ГЕНЕРАЦИЯ ДЕФЕКТОВ ПРИ УДАРНОМ СЖАТИИ АЛЮМИНИЯ

С. Д. Гилёв

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск, gilev@hydro.nsc.ru

Измерение электросопротивления ударно-сжатого алюминия используется в настоящей работе для оценки концентрации точечных дефектов, генерируемых фронтом ударной волны. При помощи моделирования ударно-волновых процессов в измерительной ячейке находятся параметры физического состояния тонкого металлического образца. Экспериментальные значения удельного электросопротивления алюминия сравниваются с предсказаниями модели равновесного электросопротивления. Построенная модель хорошо описывает имеющиеся на сегодняшний день опорные данные по равновесному изотермическому сжатию и изобарическому нагреву алюминия. Вместе с тем в ударно-волновом эксперименте регистрируется большее удельное электросопротивление, чем следует из модели электросопротивления равновесного бездефектного кристалла. Обнаруженная разница в удельном электросопротивлении свидетельствует о генерации дефектов кристаллической структуры металла при динамическом сжатии. В предположении преимущественного образования вакансий оценена концентрация дефектов в алюминии в зависимости от давления ударной волны. Количество дефектов в металле увеличивается при росте давления ударной волны. Полученные данные качественно согласуются с известными результатами для меди и серебра, что позволяет утверждать, что генерация дефектов при ударном сжатии имеет общие особенности для этих металлов. Физическое состояние ударно-сжатого алюминия является высокодефектным и термодинамически неравновесным.

Ключевые слова: дефекты кристаллической структуры, электросопротивление металлов, удельное электросопротивление, алюминий, высокие давления и температуры, ударное сжатие.

DOI 10.15372/FGV2022.9236

ВВЕДЕНИЕ

Для исследования физического состояния конденсированного вещества при высокой плотности энергии широкое распространение получили динамические методы [1–5]. Для анализа физического состояния вещества в этих условиях общепринятым является термодинамический подход. Термодинамическое уравнение состояния основывается на постулате о равновесности состояния исследуемого вещества. Кристалл полагается равновесным и бездефектным. При построении уравнения состояния кристалла свободная энергия, давление, внутренняя энергия обычно записываются в виде суммы слагаемых, соответствующих холодному сжатию, а также тепловому вкладу решетки и свободных электронов. В то же время известно, что идеальная структура кристалла существует лишь при температуре абсолютного нуля. При любой конечной температуре в кристалле имеются дефекты структуры. Их равновесная концентрация n_d^e определяется формулой Больцмана $n_d^e/n_0 \approx \exp\left(-E_d/kT\right)$, где n_0 — число молекул в единице объема кристалла, E_d — энергия образования дефекта, k — коэффициент Больцмана, T — абсолютная температура [6]. Как видно из приведенной формулы, концентрация дефектов сильно зависит от энергии дефекта и температуры. Вакансии обладают наименьшей энергией и поэтому являются наиболее экономичным способом генерации дефектов. Для характерной энергии вакансии в металле ≈ 1 эВ и комнатной температуры T = 293 К оценка дает значение относительной равновесной концентрации дефектов $n_d^e/n_0 \approx 10^{-17}$. При увеличении температуры величина n_d^e/n_0 быстро растет, но даже при T = 1000 К остается относительно небольшой ($\approx 10^{-5}$).

Известно, что пластическая деформация приводит к генерации дефектов в металле. Так, при низкоскоростной деформации $\varepsilon = 0.1$ относительная концентрация дефектов составляет $n_d^e/n_0 \approx 10^{-5}$ [6]. Рост скорости деформации приводит к увеличению концентрации дефектов. Так, при ударном сжатии генерируется заметно больше дефектов, чем при низкоскоростной деформации [7, 8].

В [9] исследовалось электросопротивление меди при ударном сжатии. Сравнение экспери-

ментальных данных с расчетом по построенной равновесной модели показало, что в эксперименте регистрируется заметно большее электросопротивление, чем предсказывает модель. Можно связать эту разницу с дополнительным сопротивлением, обусловленным генерацией дефектов структуры металла. Найденная в ударно-волновых экспериментах относительная концентрация дефектов в меди достигала $n_d/n_0 \approx 7 \cdot 10^{-3}$ [9, 10]. Это значение превышает равновесную концентрацию почти на 10 порядков величины $(n_d^e/n_0^e \approx 10^{-12}$ для условий опытов). Большое количество дефектов по сравнению с равновесным значением свидетельствует о неравновесности физического состояния вещества.

Полученная информация о дефектах в меди [9, 10] нуждается в осмыслении и обобщении. В настоящее время неясно, является ли генерация столь большого количества дефектов типичной для других металлов.

Цель настоящей работы состоит в определении концентрации дефектов в ударно-сжатом алюминии. Алюминий, так же как медь, является эталонным материалом и широко используется в физике высоких плотностей энергии, а также в различных областях техники. Анализ физического состояния алюминия важен для правильной интерпретации результатов динамических экспериментов. Для получения необходимой информации о дефектах можно использовать экспериментальные данные об электросопротивлении алюминия при ударном сжатии, полученные в [11]. Для выделения компонента электросопротивления, обусловленного дефектами, дополнительно необходима модель равновесного электросопротивления алюминия при высоких давлениях и температурах. Она может быть построена аналогично модели для меди [9] с использованием опорных данных для алюминия.

1. ПАРАМЕТРЫ СОСТОЯНИЯ ТОНКОГО АЛЮМИНИЕВОГО ОБРАЗЦА ПРИ УДАРНОМ СЖАТИИ

В [11] поставлены эксперименты по измерению электросопротивления алюминиевой фольги при ударном сжатии. Схематический чертеж измерительной ячейки, использованной в [11], показан на рис. 1. Тонкая алюминиевая фольга (толщина 15 ÷ 30 мкм) располагалась между слоями толстого диэлектри-



Рис. 1. Постановка экспериментов по измерению электросопротивления:

1 — алюминиевая фольга, 2 — диэлектрик

ка (толщина ≈5 мм). По фольге пропускался ток (оставался постоянным в процессе измерений) от внешнего источника. Регистрировалось напряжение с образца при помощи тонких выводов, расположенных в средней части образца в плоскости фольги (не показаны на рис. 1). Нагружение производилось плоской ударной волной, генерируемой зарядами конденсированных взрывчатых веществ (ВВ), которые располагались непосредственно на измерительной ячейке. Использовались заряды ВВ диаметром не менее 75 мм. База измерения электросопротивления составляла 10 мм, что обеспечивало одномерный характер сжатия фольги. Давление ударной волны в измерительной ячейке варьировалось за счет использования различных ВВ (литых и насыпных), а также ослабляющих прокладок из слоев материалов с различными ударно-волновыми импедансами. Накладной заряд ВВ генерировал в измерительной ячейке профиль давления с временем спада не менее $7 \div 10$ мкс, что существенно превышало временное разрешение метода измерений (около 10 нс). Регистрируемое напряжение представляло собой область постоянного напряжения (что соответствовало начальному состоянию образца до прихода ударной волны) и фазу резкого увеличения сигнала (соответствующую воздействию ударной волны). Два значения напряжения (до ударного воздействия и непосредственно после прихода ударной волны) позволяли найти электросопротивление ударно-сжатого образца. Электросопротивление алюминиевой фольги в [11] монотонно увеличивалось с ростом давления ударной волны. Такой характер зависимости кардинально отличался от известных зависимостей, полученных при статическом сжатии, где электросопротивление металла монотонно уменьшалось при росте давления. По электросопротивлению и известной ударной адиабате алюминия находилось удельное электросопро-



Рис. 2. Зависимость давления от времени в центральном сечении алюминиевого образца, подвергнутого ударному сжатию (давление падающей ударной волны в диэлектрике (оргстекло) 17.5 ГПа)

тивление образца. Детали постановки экспериментов и процедуры определения электросопротивления алюминия представлены в [11].

Для объяснения и дальнейшего использования полученных экспериментальных данных необходимо знать параметры физического состояния металлического образца в проведенных экспериментах. Их можно найти с помощью численного моделирования ударноволновых процессов в измерительной ячейке. Для анализа состояния фольги в слоистой системе, показанной на рис. 1, использовался одномерный гидрокод «Мастер» [12]. Использовалось уравнение состояния алюминия, которое в основном соответствует [13, 14] (кратко описано в приложении).

На рис. 2 показана полученная при моделировании зависимость давления от времени в центральном сечении алюминиевой фольги (толщина 30 мкм), расположенной между слоями оргстекла и подвергнутой ударному нагружению. Из рисунка видно, что в ходе реверберации волн сжатия и разрежения в алюминии устанавливается давление, соответствующее давлению падающей ударной волны в диэлектрике.

На рис. 3 приведена зависимость температуры алюминиевого образца от давления падающей ударной волны, найденная при помощи моделирования. Из рисунка видно, что в анализируемом диапазоне интенсивности ударной волны температура образца оказывается



Рис. 3. Зависимость температуры алюминия от давления падающей ударной волны (образец находится в оргстекле)

не слишком большой и не достигает значения, соответствующего плавлению. Действительно, при нормальном давлении температура плавления алюминия составляет $T_m \approx 933.5$ K и, как для большинства металлов, увеличивается при росте давления [15].

2. МОДЕЛЬ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ АЛЮМИНИЯ ПРИ СИЛЬНОМ СЖАТИИ

Сформулируем модель равновесного электросопротивления алюминия при сжатии. Рассматриваем область температур, в которой металл остается в твердой фазе ($T < T_m$).

Модель электросопротивления металла при высоком давлении основывается на следующих уравнениях:

$$\rho_{\rm BG}(V,T) = \frac{A(V)}{\theta_{\rm D}} \left(\frac{T}{\theta_{\rm D}}\right)^5 \times \\ \times \int_{0}^{\theta_{\rm D}/T} \frac{z^5 dz}{(e^z - 1)(1 - e^{-z})}, \quad (1)$$

$$A(V) = A_0 \left(\frac{V}{V_0}\right)^{\eta},\tag{2}$$

$$p(V,T) = p_c(V) + \frac{\Gamma(V,T)}{V} R_g \Big[\frac{9}{8} \theta_{\rm D} + 3TD \Big(\frac{\theta_{\rm D}}{T} \Big) \Big] + \frac{\Gamma_e \gamma_0 T^2}{2V} \Big(\frac{V}{V_0} \Big)^{\Gamma_e}, \qquad (3)$$

$$\theta_{\rm D}(V,T) = \theta_{\rm D0} \left(\frac{V_0}{V}\right)^{\Gamma_{\infty}} \times \\ \times \exp\left[\frac{(\Gamma_0 - \Gamma_{\infty})(1 + \beta T_0)}{\alpha(1 + \beta T)} \times \left(1 - \left(\frac{V}{V_0}\right)^{\alpha}\right)\right].$$
(4)

Уравнение (1) представляет собой формулу Блоха — Грюнайзена для удельного электросопротивления металла ρ [16]. В этом уравнении V — удельный объем, T — абсолютная температура, A(V) — функция, зависящая от особенностей геометрии поверхности Ферми, а также от деталей взаимодействия электронов и фононов, $\theta_{\rm D}$ — температура Дебая, которая принята равной характеристической температуре электросопротивления θ_R .

Уравнение (2) описывает зависимость функции A от удельного объема V. В этой формуле V_0 — удельный объем металла при нормальных условиях (температура $T_0 = 293$ K, давление $p_0 \approx 10^5$ H/м²), A_0 — значение функции A(V) при $V = V_0$.

Для замыкания уравнений (1), (2) используется уравнение состояния металла типа Ми — Грюнайзена (3). В этом уравнении $p_c(V)$ — холодное давление, $\Gamma(V,T)$ коэффициент Грюнайзена, R_g — удельная газовая постоянная, D(x) — функция Дебая, γ_0 — коэффициент электронной теплоемкости, Γ_e — аналог функции Грюнайзена для электронов. Конкретный вид функции $\Gamma(V,T)$ берется из малопараметрического уравнения состояния конденсированного вещества [13, 17], которое кратко описано в приложении.

Уравнение (4) представляет собой зависимость характеристической температуры Дебая от удельного объема и абсолютной температуры. В этом уравнении θ_{D0} — температура Дебая при нормальных условиях, Γ_0 — коэффициент Грюнайзена при нормальных условиях, Γ_{∞} — коэффициент Грюнайзена в предельном случае сильного сжатия и нагрева, α , β — константы данного металла. Уравнение (4) является следствием используемого уравнения состояния металла (см. приложение).

Система уравнений (1)–(4) определяет удельное электросопротивление металла в зависимости от удельного объема V и температуры T. Свободными параметрами системы (1)– (4) являются величины η , A_0 . Остальные параметры модели берутся из уравнения состояния алюминия. Для нахождения свободных параметров η , A_0 можно использовать известные



Рис. 4. Зависимость относительного электросопротивления алюминия от давления при гидростатическом сжатии при T = 293 K:

1 — оригинальные экспериментальные данные [18], 2 — данные [18] с учетом поправки, обусловленной корректировкой шкалы давления при p > 2.5 ГПа [19], 3 — зависимость, рассчитанная по модели (1)–(4); отрезок A соответствует погрешности реперной точки при давлении 5.5 ГПа [15]

данные по изотермическому сжатию алюминия при $T = T_0$ и изобарическому нагреву при $p = p_0$.

На рис. 4 показаны экспериментальные данные по относительному электросопротивлению алюминия при высоком давлении вместе с зависимостью, полученной при помощи модели (1)-(4).

Первые экспериментальные результаты об электросопротивлении алюминия при высоком давлении были получены в [18]. В дальнейшем, вследствие уточнения реперных давлений фазовых переходов веществ, используемых для градуировки камер высокого давления, результаты [18] были подвергнуты корректировке в [19]. Изменение шкалы давления в [19] затронуло диапазон p > 2.5 ГПа. В настоящей работе в качестве опорных данных приняты значения электросопротивления из [18] при p < 2.5 ГПа и из [19] при p > 2.5 ГПа. На рис. 4 для справки показана погрешность для реперной точки $p = 5.5 \ \Gamma \Pi a \ [15]$, соответствующей фазовому переходу Ва I — Ва II и традиционно используемой при калибровке камер высокого давления.

Электросопротивление при статическом сжатии [18] измерялось на удлиненных провод-



Рис. 5. Зависимость давления от плотности алюминия при T = 293 К (изотерма):

1 — модельная зависимость; 2 — [20], 3 — [21], 4 — [22], 5 — [23] (экспериментальные данные); 6 — [24] (расчет)

никах, а сжатие было близко к гидростатическому. В этом случае связь между электросопротивлением R и удельным электросопротивлением ρ дается уравнением

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \frac{R}{R_0} \left(\frac{V}{V_0}\right)^{1/3}.$$
(5)

Здесь ρ_0 — начальное удельное электросопротивление, R_0 — начальное электросопротивление образца, соответствующие нормальным условиям.

На рис. 5 показана нормальная изотерма алюминия (T = 293 K), найденная при помощи использованного уравнения состояния, а также приведены доступные экспериментальные и расчетные данные. Как видно из рисунка, в интересующей нас области давления настоящее уравнение состояния хорошо описывает экспериментальные данные по сжимаемости алюминия.

Экспериментальные данные по изотермическому сжатию алюминия при комнатной температуре (см. рис. 4) позволяют найти величину η . Для этого модельная зависимость $R(p)/R_0$ подбиралась таким образом, чтобы соответствовать опорным данным при гидростатическом сжатии (штриховая кривая на рис. 4). Величина A_0 находилась из условия равенства удельного электросопротивления, определяемого по формуле (1) при нормальных условиях ($V = V_0$, $T = T_0$), табличному значению удельного электросопротивления чистого



Рис. 6. Зависимость относительного удельного электросопротивления алюминия от температуры при атмосферном давлении:

1 — экспериментальные данные [25], 2 — модельная зависимость $(1){-}(4)$

алюминия ρ_p : $\rho_{\rm BG}(V_0, T_0) = \rho_p$. Величина ρ_p принята равной рекомендованному в [25] значению 2.65 · 10⁻⁶ Ом · см. Найденные значения параметров модели составили: $\eta = -0.9$, $A_0 = 6.268 \cdot 10^3$ Ом · см/К.

На рис. 6 показаны экспериментальные данные по изобарическому нагреву алюминия при атмосферном давлении [25] вместе с модельной зависимостью согласно уравнениям (1)-(4). При нахождении удельного электросопротивления с помощью малопараметрического уравнения состояния учитывалось тепловое расширение алюминия. В области малых температур (T < 20 K) отклонения модели от экспериментальных данных обусловлены влиянием примесей в образцах. При T > 933.5 K алюминий находится в жидком состоянии, которое данная модель не описывает. Можно констатировать, что модель (1)-(4) описывает изменения удельного электросопротивления в диапазоне примерно четырех порядков величины, в частности, в области температур, где находятся параметры состояния ударно-сжатого алюминия в наших экспериментах.

В целом представленные на рис. 4–6 результаты позволяют утверждать, что модель электросопротивления (1)–(4) хорошо описывает изотермическое сжатие и изобарический нагрев алюминия в твердой фазе. Важно понимать, что известные опорные данные [18–25] получены в стационарных условиях и соответ-



Рис. 7. Относительное удельное электросопротивление алюминия в зависимости от давления ударной волны:

1 — экспериментальные данные [11], 2 — данные, полученные пересчетом из [26], 3 — аппроксимация данных 1 и 2 полиномиальной зависимостью, 4 — определение удельного электросопротивления по модели равновесного электросопротивления (1)–(4)

ствуют состоянию термодинамического равновесия алюминия. Поэтому модель электросопротивления (1)–(4) с найденными значениями свободных параметров η , A_0 характеризует равновесное состояние металла в области больших давлений и температур.

3. СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ УДАРНО-ВОЛНОВОГО ЭКСПЕРИМЕНТА И МОДЕЛИ РАВНОВЕСНОГО ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ

На рис. 7 показана экспериментальная зависимость относительного удельного электросопротивления алюминия от давления ударной волны. Точки 1 соответствуют размещению образца между слоями оргстекла и получены в наших экспериментах [11]. Здесь же показаны данные измерения электросопротивления [26], где алюминиевая фольга размещалась в оргстекле, что соответствует постановке наших опытов. Для представления на рис. 7 оригинальные данные [26] были пересчитаны в удельное электросопротивление. Как видно из рисунка, результаты наших экспериментов и [26] качественно согласуются. Кривая 3 является результатом аппроксимации всех имеющихся данных полиномиальной зависимостью.

Из рисунка следует, что удельное электросопротивление алюминия испытывает значительный рост при увеличении давления ударной волны.

Кривая 4 на том же рис. 7 соответствует предсказаниям модели равновесного электросопротивления алюминия (1)-(4). При построении кривой 4 величина удельного электросопротивления $\rho_{BG}(V,T)$ вычислялась для значений удельного объема V и температуры T, соответствующих определенному давлению ударной волны. Как видно из рис. 7, модельная зависимость удельного электросопротивления демонстрирует сложное поведение: при малом давлении удельное электросопротивление уменьшается, при большом — увеличивается при росте давления. Такое поведение обусловлено разнонаправленным влиянием сжатия и температурного нагрева на удельное электросопротивление. По этой причине на зависимости удельного электросопротивления от давления возможно появление минимума. На модельной зависимости минимум удельного электросопротивления соответствует давлению $p \approx 3 \ \Gamma \Pi a$.

Из сравнения экспериментальной и модельной зависимостей (кривые 3 и 4 соответственно) видно, что в эксперименте регистрируются большие значения электросопротивления, чем следует из модели равновесного электросопротивления. Разница между зависимостями 3 и 4 представляет собой некоторое дополнительное электросопротивление ρ_d . Его наличие свидетельствует о возникновении дефектов кристаллической структуры при ударном сжатии. Важно, что электросопротивление ρ_d отсутствует в условиях термодинамического равновесия (о чем свидетельствует согласие между моделью и опорными данными по изотермическому сжатию и изобарическому нагреву [18, 19, 25]) и появляется лишь при динамическом сжатии. Из рис. 7 видно, что электросопротивление ρ_d равно нулю в начальных условиях и увеличивается с ростом давления ударной волны. По величине электросопротивления ρ_d можно оценить концентрацию возникающих при данных условиях дефектов.

4. КОНЦЕНТРАЦИЯ ДЕФЕКТОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ УДАРНОМ СЖАТИИ АЛЮМИНИЯ

Концентрация дефектов кристаллической структуры алюминия n_d оценивалась по вели-



Рис. 8. Зависимость концентрации дефектов от давления ударной волны для алюминия (1 — результат обработки данных 1 с рис. 7, 2 — данных 2 с рис. 7, 3 — аппроксимирующая зависимость), меди [10] (точки 4), серебра [30] (точки 5)

чине удельного дополнительного электросопротивления ρ_d следующим образом:

$$n_d \approx \rho_d / \rho_v.$$
 (6)

Здесь ρ_v — удельное электросопротивление, соответствующее 1 ат. % дефектов. При вычислениях принято, что преобладающим типом дефектов являются вакансии (обсуждение этого положения дано в [10]) и $\rho_v =$ 1.69 мкОм · Om/ат. % (среднее значение для ρ_v , соответствующее данным для алюминия, приведенным в [6, 27–29]).

На рис. 8 показана найденная по формуле (6) зависимость концентрации дефектов от давления ударной волны для алюминия. Точки 1 и 2 представляют собой результат обработки данных 1 и 2, приведенных на рис. 7 и соответствующих экспериментам [11] и [26]. Кривая 3 получена из зависимости 3 на рис. 7. Несмотря на значительный разброс данных, из рис. 8 можно сделать вывод, что концентрация дефектов в ударно-сжатом алюминии растет при увеличении давления ударной волны, достигая значения около 0.5 ат. %.

5. ОБСУЖДЕНИЕ

Одним из результатов настоящей работы является обнаружение компонента электросопротивления, который не описывается классическим уравнением Блоха — Грюнайзена. Как ясно из сравнения (§ 2 и 3), дополнительный компонент возникает лишь при динамическом сжатии. Его существование свидетельствует о возникновении дефектов кристаллической структуры, приводящих к росту электросопротивления металла.

Следует отметить, что найденное выше значение концентрации дефектов в ударносжатом алюминии является результатом оценок, полученных в рамках сформулированных предположений о преимущественном образовании вакансий, справедливости модели равновесного электросопротивления алюминия и принятого значения удельного электросопротивления ρ_v . Тем не менее интересно сравнить полученные результаты с другими данными.

На рис. 8 вместе с данными для алюминия, полученными на основе экспериментов [11] и [26], приведены имеющиеся на сегодняшний день результаты для других металлов — меди [10] и серебра [30]. Таким образом, в совокупности на рисунке представлено четыре массива точек, соответствующие разным металлам.

Концентрации дефектов при одинаковом давлении ударной волны для трех металлов различаются, но соответствуют одному и тому же порядку величины (~0.1 ат. %). Разброс данных как внутри каждого массива, так и между ними значителен. Это в большой степени обусловлено качеством первичных измерений электросопротивления металлического образца. Электросопротивление является чувствительным параметром состояния вещества. В однократных экспериментах вследствие действия случайных факторов наблюдается некоторая вариация параметров падающей ударной волны. В экспериментах с образцом, размещенным в оргстекле, регистрация напряжения дополнительно осложнена поляризационным сигналом. Процедура выделения из первичных данных дефектного электросопротивления на основе сравнения с моделью равновесного электросопротивления естественным образом приводит к увеличению относительной погрешности искомой величины. Несмотря на значительный разброс, совокупность экспериментальных данных для трех металлов свидетельствует об общей тенденции увеличения концентрации дефектов при росте давления ударной волны.

Сравним зарегистрированную концентрацию дефектов в ударно-сжатом алюминии с термодинамически равновесной концентрацией, определяемой формулой Больцмана. Энергия образования вакансии в алюминии составляет ≈0.67 эВ [6, 31]. Температура алюминия в проведенных экспериментах не превышает 600 К (см. рис. 3). Для этих параметров равновесная концентрация дефектов составляет $n_d^e/n_0 \approx 2 \cdot 10^{-6}$. Согласно рис. 8 при давлений падающей ударной волны 17.5 ГПа найденная концентрация дефектов равна $n_d/n_0 pprox$ $(4 \div 5) \cdot 10^{-3}$. Таким образом, экспериментально определенная концентрация дефектов алюминия в $\approx 10^3$ раз превышает равновесную концентрацию. Это означает, что физическое состояние ударно-сжатого алюминия характеризуется высокой термодинамической неравновесностью. Ранее термодинамическая неравновесность была обнаружена для ударно-сжатой меди [10]. Полученные в настоящей работе данные дают основания рассматривать термодинамическую неравновесность как характерную особенность ударно-сжатого металла. Настоящий результат важен для понимания специфики состояния ударно-сжатого вещества по сравнению с равновесным гидростатическим сжатием.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построена модель равновесного электросопротивления твердой фазы алюминия в области высоких давлений. Сравнением экспериментальных данных, полученных при ударном сжатии, с результатами моделирования обнаружен компонент электросопротивления, который не описывается классическим уравнением Блоха — Грюнайзена. Оценена концентрация дефектов в ударно-сжатом алюминии и ее зависимость от давления ударной волны. Физическое состояние ударно-сжатого алюминия является высокодефектным и существенно неравновесным. Можно предположить, что высокодефектное неравновесное состояние характерно для других ударно-сжатых металлов.

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Альтшулер Л. В. Применение ударных волн в физике высоких давлений // Успехи физ. наук. — 1965. — Т. 85, вып. 2. — С. 197–258.
- Фортов В. Е. Динамические методы в физике плазмы // Успехи физ. наук. — 1982. — Т. 138. — С. 361–412.

- 3. Аврорин Е. Н., Водолага Б. К., Симоненко В. А., Фортов В. Е. Мощные ударные волны и экстремальные состояния вещества // Успехи физ. наук. — 1993. — Т. 163, № 5. — С. 1–34.
- Ударные волны и экстремальные состояния вещества / под ред. В. Е. Фортова, Л. В. Альтшулера, Р. Ф. Трунина, А. И. Фунтикова. — М.: Наука, 2000.
- 5. Fortov V. E. Extreme States of Matter High Energy Density Physics. — Springer, 2016. — (Springer Series in Materials Science).
- Cahn R. W., Haasen P. Physical Metallurgy. 4th ed. — North Holland, 1996.
- Kressel H., Brown N. Lattice defects in shockdeformed and cold-worked nickel // J. Appl. Phys. — 1967. — V. 38, N 4. — 1618. — DOI: 10.1063/1.1709733.
- 8. Могилевский М. А. Изменения структуры в чистой меди при взрывном нагружении // Физика горения и взрыва. 1970. Т. 6, № 2. С. 224–229.
- 9. Гилев С. Д. Электросопротивление меди при больших давлениях и температурах: равновесная модель и генерация дефектов кристаллической структуры при ударном сжатии // Физика горения и взрыва. — 2019. — Т. 55, № 5. — С. 116–125. — DOI: 10.15372/FGV20190514.
- Гилев С. Д. Неравновесность физического состояния меди при ударном сжатии // Физика горения и взрыва. — 2021. — Т. 57, № 3. — С. 135–142. — DOI: 10.15372/FGV20210314.
- 11. Гилев С. Д. Электросопротивление алюминия при ударном сжатии: экспериментальные данные // Физика горения и взрыва. — 2023. — Т. 59, № 1. — С. 129–136. — DOI: 10.15372/FGV20230114.
- Rudenko V. V., Shaburov M. V. User software MAG for personal computers as a tool for numerical simulation of one-dimensional magneto-hydrodynamic flows // Proc. 10th Int. Conf. on Megagauss Magnetic Field Generation and Related Topics, Berlin, 2004 / M. von Ortenberg (Ed.) Berlin: Humboldt Univ., 2005. P. 321–324.
- Гилев С. Д. Малопараметрическое уравнение состояния алюминия // Теплофизика высоких температур. — 2020. — Т. 58, № 2. — С. 179– 187. — DOI: 10.31857/S0040364420020076.
- 14. Гилев С. Д. Изотерма алюминия, построенная на основе обобщенного уравнения для коэффициента Грюнайзена // Физика горения и взрыва. 2022. Т. 58, № 2. С. 109–117. DOI: 10.15372/FGV2022212.
- 15. **Тонков Е. Ю.** Фазовые диаграммы элементов при высоком давлении. М.: Наука, 1979.
- Займан Дж. Электроны и фононы. Теория явлений переноса в твердых телах: пер. с англ. М.: Изд-во иностр. лит., 1962.

- Гилев С. Д. Малопараметрическое уравнение состояния меди // Физика горения и взрыва. — 2018. — Т. 54, № 4. — С. 107–122. — DOI: 10.15372/FGV20180412.
- Bridgman P. W. The resistance of 72 elements, alloys and compounds to 100,000 kg/cm² // Proc. of the Am. Acad. of Arts and Sci. — 1952. — V. 81, N 4. — P. 165–251. — DOI: 10.2307/20023677.
- Bundy F. P., Strong H. M. Behavior of metals at high temperatures and pressures // Solid State Phys. — 1962. — V. 13. — P. 81–146. — DOI: 10.1016/S0081-1947(08)60456-7.
- Syassen K., Holzapfel W. B. Isothermal compression of Al and Ag to 120 kbar // J. Appl. Phys. — 1978. — V. 49, N 8. — P. 4427–4430. — DOI: 10.1063/1.325497.
- Ming L. C., Xiong D., Manghnani M. H. Isothermal compression of Au and Al to 20 GPa // Physica B + C. — 1986. — V. 139–140. — P. 174– 176. — DOI: 10.1016/0378-4363(86)90551-6.
- 22. Dewaele A., Loubeyre P., Mezouar M. Equations of state of six metals above 94 GPa // Phys. Rev. B. — 2004. — V. 70, N 9. — 094112. — DOI: 10.1103/PhysRevB.70.094112.
- Akahama Y., Nishimura M., Kinoshita K., Kawamura H., Ohishi Y. Evidence of a fcc-hcp transition in aluminum at multimegabar pressure // Phys. Rev. Lett. — 2006. — V. 96, N 4. — 045505. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.96.045505.
- Lomonosov I. V. Multi-phase equation of state for aluminum // Laser Particle Beams. — 2007. — V. 25, N 4. — P. 567–584. — DOI: 10.1017/S0263034607000687.
- Desai P. D., James H. M., Ho C. Y. Electrical resistivity of aluminum and manganese // J. Phys. Chem. Ref. Data. — 1984. — V. 13. — P. 1131– 1172. — DOI: 10.1063/1.555725.
- 26. Гончаров А. И., Родионов В. Н. Электросопротивление меди и алюминия при ударноволновых нагружениях // II Всесоюз. конф. «Лаврентьевские чтения по математике, механике и физике»: тез. докл. — Киев, 1985. — С. 72–73.
- 27. Дамаск А., Динс Дж. Точечные дефекты в металлах. М.: Мир, 1966.
- Волков В. А. Электросопротивление металлов с вакансиями // Физика металлов и металловедение. — 1980. — Т. 50, № 5. — С. 1094– 1097.
- 29. **Kraftmakher Y.** Lecture Notes on Equilibrium Point Defects and Thermophysical Properties of Metals. — Singapore: Word Scientific, 2000.
- Dick J. J., Styris D. L. Electrical resistivity of silver foils under uniaxial shock-wave compression // J. Appl. Phys. — 1975. — V. 46, N 4. — P. 1602–1617. — DOI: 10.1063/1.321762.
- Орлов А. Н., Трушин Ю. В. Энергии точечных дефектов в металлах. — М.: Энергоатомиздат, 1983.

ПРИЛОЖЕНИЕ

МАЛОПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ АЛЮМИНИЯ В ОБЛАСТИ ВЫСОКИХ ПЛОТНОСТЕЙ ЭНЕРГИИ

Свободная энергия Гельмгольца твердого тела традиционно представляется тремя слагаемыми, описывающими холодное сжатие, тепловые компоненты кристаллической решетки и электронов в рамках теории Дебая:

$$F(V,T) = E_c(V) + R_g T \left\{ \frac{9}{8} \frac{\theta_{\rm D}}{T} + 3\ln\left[1 - \exp\left(-\frac{\theta_{\rm D}}{T}\right)\right] - D\left(\frac{\theta_{\rm D}}{T}\right) \right\} - \frac{\gamma_0 T^2}{2} \left(\frac{V}{V_0}\right)^{\Gamma_e}.$$
 (II.1)

Здесь R_g — удельная газовая постоянная, γ_0 — коэффициент электронной теплоемкости, Γ_e — аналог функции Грюнайзена для электронов, D(x) — функция Дебая:

$$D(x) = \frac{3}{x^3} \int_{0}^{x} \frac{z^3 dz}{e^z - 1}, \quad x = \frac{\theta_{\rm D}}{T},$$

 $E_c(V)$ — холодная энергия вещества:

$$E_c(V) = -\int_{V_{0\mathrm{K}}}^{V} p_c(V) \, dV,$$

где p_c — холодное давление, V_{0K} — удельный объем, соответствующий условию $p_c(V_{0K}) = 0$.

Коэффициент Грюнайзена рассматривается в виде следующей зависимости от удельного объема и температуры [13, 17]:

$$\Gamma(V,T) = \Gamma_{\infty} + \left(\frac{V}{V_0}\right)^{\alpha} \frac{\Gamma_0 - \Gamma_{\infty}}{1 + \beta T} (1 + \beta T_0), \qquad (\Pi.2)$$

где Γ_0 — коэффициент Грюнайзена при нормальных условиях, Γ_{∞} — коэффициент Грюнайзена в предельном случае сильного сжатия и нагрева, α , β — константы данного металла, характеризующие соответственно влияние сжатия и температуры.

Зависимость (П.2) качественно правильно описывает поведение коэффициента Грюнайзена металлов при сильном сжатии и высокой температуре [17]. Обобщенное модельное уравнение [1] связывает коэффициент Грюнайзена Γ и холодное давление p_c :

$$\Gamma = -\frac{V}{2} \frac{\partial^2 \left(p_c V^{2t/3} \right) \partial V^2}{\partial \left(p_c V^{2t/3} \right) \partial V} + \frac{t-2}{3}, \quad (\Pi.3)$$

где t — безразмерная величина. В настоящем подходе, в отличие от [13, 17], величина t рассматривается как функция удельного объема t = t(V).

Интегрируя (П.3) при T = 0, находим холодное давление

$$p_c(x) = x^{-2t(x)/3} \times \left(C_1 + C_2 \int_1^x \exp\left(z(s)\right) ds\right), \qquad (\Pi.4)$$

ο.

a.() /a

где

$$z(s) = -2\left(\gamma_{\infty} + \frac{2}{3}\right)\ln(s) - 2\frac{(\Gamma_0 - \Gamma_\infty)(1 + \beta T_0)}{V_0^{\alpha}}\int_1^s \frac{\tau^{\alpha}}{\tau} d\tau + \frac{2}{3}\int_1^s \frac{t(\tau)}{\tau} d\tau.$$

Здесь используется безразмерная величина $x = V/V_0$, а C_1, C_2 являются константами интегрирования.

Параметр t в уравнении (П.3) полагается зависящим от плотности вещества:

$$t(x) = t_0 + (t_{\infty} - t_0) \left[1 - \exp\left(-k\left(\frac{1}{x} - 1\right)\right) \right], (\Pi.5)$$

где t_0 — значение параметра t при $V = V_0$, t_{∞} — предельное значение параметра t при $V \to 0$, $k = V_*/V_0$, V_* — характеристический удельный объем.

Константы C_1 , C_2 в (П.4) находятся из следующих физических условий:

$$p(V_0, T_0) = p_0, \tag{\Pi.6}$$

 \times

$$-V\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T\Big|_{\substack{V=V_0\\T=T_0}} = K_{T0}.$$
 (II.7)

Уравнение (П.6) означает, что давление p при нормальных условиях равно атмосферному давлению p_0 . Согласно уравнению (П.7), изотермический модуль объемного сжатия при нормальных условиях равен своему экспериментальному значению K_{T0} .

Свободная энергия Гельмгольца является термодинамическим потенциалом, поэтому из уравнения (П.1) может быть найдена любая термодинамическая величина. Так, давление и внутренняя энергия находятся следующим образом:

$$p(V,T) = -\frac{\partial F}{\partial V} = p_c(V) + \frac{\Gamma(V,T)}{V} R_g \left[\frac{9}{8} \theta_{\rm D} + 3TD \left(\frac{\theta_{\rm D}}{T} \right) \right] + \frac{\Gamma_e \gamma_0 T^2}{2V} \left(\frac{V}{V_0} \right)^{\Gamma_e}, \qquad (\Pi.8)$$

$$\begin{split} E(V,T) &= F - T \frac{\partial F}{\partial T} = \\ &= E_c(V) + \frac{9}{8} \left(1 + M\right) R_g \theta_{\rm D} + \\ &+ 3(1 + M) R_g T D \left(\frac{\theta_{\rm D}}{T}\right) + \frac{\gamma_0 T^2}{2} \left(\frac{V}{V_0}\right)^{\Gamma_e}, \end{split}$$
где $M(V,T) = -\left(\frac{\partial \ln \theta_{\rm D}}{\partial \ln T}\right)_V. \end{split}$

Уравнение (П.8) используется в сформулированной выше модели электросопротивления в качестве соотношения (3).

Коэффициент Грюнайзена Г связан с характеристической температурой Дебая $\theta_{\rm D}$ в квазигармоническом приближении известным соотношением

$$\Gamma = -\left(\frac{\partial \ln \theta_{\rm D}}{\partial \ln V}\right)_T.$$

Интегрируя это уравнение, найдем зависимость температуры Дебая от удельного объема и абсолютной температуры:

$$\theta_{\rm D}(V,T) = \theta_{\rm D0} \left(\frac{V_0}{V}\right)^{\Gamma_{\infty}} \times \\ \exp\left[\frac{(\Gamma_0 - \Gamma_{\infty})(1 + \beta T_0)}{\alpha(1 + \beta T)} \left(1 - \left(\frac{V}{V_0}\right)^{\alpha}\right)\right], \quad (\Pi.9)$$

где θ_{D0} — температура Дебая при нормальных условиях. Уравнение (П.9) используется в

Коэффициенты состояния алюминия	
Параметр	Значение
Плотность, г/см 3	2.71
$R_g, \kappa Дж/(\mathbf{\Gamma} \cdot \mathbf{K})$	$3.08 \cdot 10^{-4}$
Γ_0	2.14
Γ_{∞}	2/3
$\theta_{\rm D0},{ m K}$	390
$K_{T0},$ ГПа	72.2
γ_0,κ Дж/(г \cdot K ²)	$5.03 \cdot 10^{-8}$
Γ_e	0.5
C_1 , ГПа	-1.70919
C_2 , $\Gamma \Pi a$	-385.108
$ ho_{0\mathrm{K}},\mathrm{r/cm}^3$	2.77183
α	1.8
$\beta, 10^{-4} \mathrm{K}^{-1}$	1
t_0	-0.3
t_{∞}	0.35
k	5

Коэффициенты состояния алюминия

сформулированной выше модели электросопротивления.

Используемые значения констант уравнения состояния алюминия приведены в таблице. Постоянные V_0 , Γ_0 , $\theta_{\rm D0}$, γ_0 известны из справочной литературы. Из квантовостатистической модели Томаса — Ферми следует, что $\Gamma_{\infty} = 2/3$. Параметры α , β , t_{∞} , kподбираются из условия согласования предсказаний модели уравнения состояния и известных кривых холодного сжатия, нормальной изотермы и ударных адиабат сплошного и пористого вещества. Параметр Γ_e определялся на участке ударной адиабаты сплошного алюминия, соответствующем максимальным давлениям.

Настоящее уравнение состояния удовлетворительно описывает широкий спектр физических состояний алюминия при высоких плотностях энергии, в том числе ударное сжатие сплошного и пористого вещества при экстремальных давлениях [13, 14].

> Поступила в редакцию 17.10.2022. После доработки 20.02.2023. Принята к публикации 01.03.2023.