

# Теоретическая и прикладная физика

## выпуск 3 – 2022 год

### РЕФЕРАТЫ

УДК 536.75; 533.9.01

РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ВОДОРОДА ИСХОДЯ ИЗ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ / Б. А. НАДЫКТО, О. Б. НАДЫКТО, А. Б. НАДЫКТО // ВАНТ. СЕР. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА. 2022. ВЫП. 3. С. 3–20.

Термодинамические свойства различных изотопов водорода в экстремальных условиях критически важны для физики плазмы, включая термоядерный синтез с инерционным удержанием (ICF), и астрофизики, включая теплое плотное вещество (WDM). Основная проблема при расчете термодинамических свойств водородной плазмы состоит в том, что ее статистическая сумма (СС) с энергетическими уровнями свободных атомов H расходится. Здесь мы показываем, что СС атомов H с уровнями энергии, учитывающими конечный размер атомной ячейки в экстремальных условиях, сходится и, таким образом, может использоваться для прямых вычислений соответствующих термодинамических функций с очень низкими вычислительными затратами. Конечная СС была использована для получения универсального уравнения состояния (УРС) водорода в широком диапазоне параметров. Получено УРС, которое адекватно описывает состояние водорода во всем диапазоне плотностей и температур, включая холодную кривую. Показано, что новый УРС хорошо согласуется с имеющимися измерениями и расчетами, выполненными с использованием самых современных вариантов теории функций плотности (DFT) и квантовых методов Монте-Карло. Это означает, что новый подход представляет собой жизнеспособную недорогую альтернативу вышеупомянутым традиционным методам, вычислительные затраты которых во многих случаях непомерно высоки. Поскольку сходящаяся СС и соответствующие термодинамические функции были выведены в аналитической форме, полученные формулы могут использоваться при моделировании множества процессов и систем, играющих важную роль в физике плазмы и астрофизике, включая ICF и WDM.

УДК 539.89; 539.58

ЭЛЕКТРОННЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СЖАТЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ И НОВЫЕ ШКАЛЫ ДАВЛЕНИЯ ДЛЯ СНИЖЕНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ПРИ КАЛИБРОВКЕ ДАВЛЕНИЯ / Б. А. НАДЫКТО, О. Б. НАДЫКТО, А. Б. НАДЫКТО // ВАНТ. СЕР. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА. 2022. ВЫП. 3. С. 21–37.

Показано, что безразмерное уравнение состояния (УРС) для холодного давления  $P/3B_0 = (\sigma^{5/3} - \sigma^{4/3})$ , где  $B$  – модуль объемного сжатия,  $\rho$  – плотность,  $\sigma = \rho/\rho_0$  – степень сжатия, а индекс 0 относится к свойствам материала при нулевой температуре  $T=0$  К и давлении  $P=0$  ГПа, является универсальным и адекватно описывает сжатие металлов, диэлектриков и соединений. Предложено и оценено по экспериментальным данным новое холодное УРС для алмаза с  $\rho_0 = 3,515$  г·см<sup>-3</sup> и  $B_0 = 442$  ГПа. Тщательная оценка нового уравнения состояния показывает, что оно хорошо согласуется с экспериментами по статическому и ударному сжатию при давлениях до 1400 ГПа. Таким образом, оно может использоваться в

качестве новой алмазной шкалы давления, где плотность алмаза и исследуемого материала измеряется с помощью рентгеновской дифракции, а  $P(\rho)$  выражается через EOS алмаза. Разработана новая рубиновая шкала

$$\text{давления } P = \frac{1904}{7,2} \left( \left( 1 + \frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} \right)^{7,2} - 1 \right), \text{ где } \lambda_0 = 694,24 - \text{длина волны линии}$$

флуоресценции рубина R1, а  $\Delta\lambda = \Delta\lambda(\rho)$  – сдвиг линии при сжатии.

УДК 536.71; 524.3-17; 510.67

РЕЛЯТИВИСТСКОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ / Б. А. НАДЫКТО, О. Б. НАДЫКТО, А. Б. НАДЫКТО // ВАНТ. СЕР. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА. 2022. ВЫП. 3. С. 38-44.

Выведено новое релятивистское уравнение состояния при нулевой температуре, исходя из предположения, что все упругое (холодное) давление в твердом теле возникает в результате изменения энергии электронов атома при условии квантования их релятивистского момента импульса. Получена формула для релятивистской энергии электронов и оценена величина плотности, при которой эта энергия превышает значение  $(m_n - m_p)c^2$ . При этом происходит превращение протонов в нейтроны (нейтронизация протонов). Определено давление, которое в промежуточной асимптотике,  $\gamma = 5/3$ , в 2,1 раза ниже, чем давление вырожденного электронного газа.

## А Б С Т Р А К Т

HYDROGEN THERMODYNAMIC CHARACTERISTICS FROM STATISTIC SUM / B. A. NADYKTO, O. B. NADYKTO, A. B. NADYKTO // VANT. SER.: TEORET. I PRIKL. FIZIKA. 2022, N 3. P. 3–20.

Thermodynamic properties of different isotopes of hydrogen under extreme conditions are critically important for physics of plasmas and astrophysics, including Inertial Confinement Fusion (ICF) and Warm Dense Matter (WDM). The main problem in calculating thermodynamic properties of hydrogen plasma is that its statistical sum (STS) with energy levels of free H atoms diverges. Here, we show that the STS of hydrogen atoms with the energy levels accounting for the finite size of the atomic cell converges, and, thus, can be used for direct calculations of the corresponding thermodynamic functions at very low computational costs. The convergent STS has been employed to derive a universal wide-range Equation of State (EoS) of hydrogen, which adequately describes its state over the full range of densities and temperatures, and is shown to agree well with available measurements and calculations carried out using the latest updated versions of the Density Functional Theory (DFT) and quantum Monte Carlo methods. This means the new approach is a viable low-cost alternative to the above-mentioned conventional methods, whose computational costs are, in many cases, prohibitively high. Since the convergent STS and the corresponding thermodynamic functions are available in a closed analytical form, they can be used in modeling a variety of processes and systems playing an important role in plasma physics and astrophysics, ICF and WDM.

ELECTRONIC PHASE TRANSITIONS IN COMPRESSED SOLIDS AND NEW PRESSURE SCALES TO REDUCE UNCERTAINTY IN PRESSURE CALIBRATION / B. A. NADYKTO, O. B. NADYKTO, A. B. NADYKTO // VANT. SER.: TEORET. I PRIKL. FIZIKA. 2022, N 3. P. 21–37.

It is shown that the dimensionless equation of state (EOS) for cold pressure  $P/3B_0 = (\sigma^{5/3} - \sigma^{4/3})$ , where B is the bulk modulus,  $\rho$  is the density,  $\sigma = \rho/\rho_0$  is the degree of compression, and index 0 refers to the properties of

the material at zero temperature  $T = 0$  K and pressure  $P = 0$  GPa, is universal and adequately describes the compression of various metals, dielectrics, and compounds. A new cold EoS for diamond with  $\rho_0 = 3,515 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$  and  $B_0 = 442$  GPa has been proposed and validated against experimental data. A careful evaluation of the new equation of state shows that it agrees well with experiments on the static and shock compression at pressures up to 1400 GPa. Thus, it can be used as a new diamond pressure scale, where the density of diamond and test material is measured by X-ray diffraction and  $P(\rho)$  is expressed in terms of the diamond EoS. A new ruby pressure scale has been developed  $P = \frac{1904}{7,2} \left( \left( 1 + \frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} \right)^{7.2} - 1 \right)$ , where  $\lambda_0 = 694.24$  is the wavelength of the ruby  $R1$  fluorescence line, and  $\Delta\lambda = \Delta\lambda(\rho)$  is the line shift upon compression.

RELATIVISTIC EQUATION OF STATE / B. A. NADYKTO, O. B. NADYKTO, A. B. NADYKTO // VANT. SER.: TEORET. I PRIKL. FIZIKA. 2022, N 2. P. 38-44.

A new relativistic equation of state at zero temperature is derived based on the assumption that all the elastic (cold) pressure in a solid arises as a result of a change in the energy of the electrons of an atom under the condition of quantization of their relativistic angular momentum. A formula was obtained for the relativistic energy of electrons and the density value at which this energy exceeds  $(m_n - m_p)c^2$  was estimated. In this case, the transformation of protons into neutrons (neutronization of protons) occurs. The pressure is determined, which in the intermediate asymptotics  $\gamma = 5/3$ , is 2.1 times lower than the pressure of the degenerate electron gas.