

01,13

## Объемно-температурная зависимость электросопротивления и теплопроводности ванадия при высоких давлениях

© А.М. Молодец, А.А. Голышев, В.В. Ким

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия

E-mail: molodets@icp.ac.ru

Поступила в Редакцию 10 апреля 2025 г.

В окончательной редакции 7 мая 2025 г.

Принята к публикации 7 мая 2025 г.

Представлены экспериментально-расчетные результаты исследования объемно-температурной зависимости удельного электросопротивления ванадия при высоких давлениях и повышенных температурах. Экспериментальная часть работы содержит измерения электросопротивления ударно-сжатых образцов ванадия при ступенчато-циклическом ударном сжатии в диапазоне давлений до 70 ГПа и температур до 750 К. Проведены расчеты истории термодинамического состояния ударно-сжимаемого ванадия. Показано, что эффект насыщения удельного электросопротивления ванадия, имеющий место при атмосферном давлении, сохраняется и при гигапаскальных давлениях. Сформулирована полуэмпирическая трактовка закономерностей объемно-температурной зависимости электросопротивления и теплопроводности ванадия, позволяющая прогнозировать эти свойства до давлений гигапаскального диапазона.

**Ключевые слова:** насыщение электросопротивления, высокие давления, ударное сжатие, теплопроводность.

DOI: 10.61011/FTT.2025.05.60736.75-25

### 1. Введение

Хорошо известно (см. [1,2]), что рост удельного электросопротивления многих металлов и сплавов с увеличением температуры замедляется. Наглядно этот эффект выражается в форме *s*-образного графика температурной зависимости электросопротивления с выходом на предел (насыщение) при высоких температурах. Существование насыщения температурной зависимости электросопротивления металлических материалов теоретически обосновывается критерием Иоффе–Регеля, согласно которому максимальное значение электросопротивления металла достигается по мере приближения длины свободного пробега электронов проводимости к межатомному расстоянию в этом металле.

Кроме очевидного теоретического интереса насыщение электросопротивления конкретных металлов играет важную роль, например, в геофизических приложениях, когда предпринимаются оценки электронной составляющей теплопроводности планетарных недр при высоких давлениях на основе закона Видемана–Франца (см. [3] и ссылки в ней).

Для ванадия, обладающего эффектом насыщения температурной зависимости электросопротивления, имеется обширный массив соответствующих экспериментальных данных (см. [4] и ссылки в ней). Однако следует отметить, что представленные в работе [4] высокотемпературные экспериментальные данные по электросопротивлению ванадия получены лишь при атмосферном давлении, в то время как сведения об эффекте насыщения электросопротивления в этом металле при высоких давлениях в доступной литературе отсутствуют.

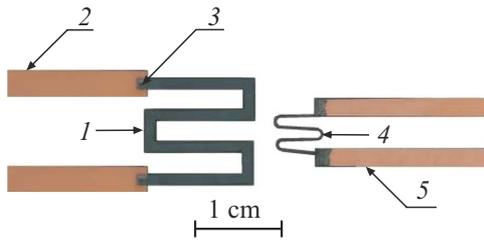
В контексте сделанного введения цель данной работы заключалась в экспериментально-расчетном исследовании эффекта насыщения электросопротивления ванадия при высоких давлениях гигапаскального диапазона с последующей реконструкцией объемно-температурной зависимости электросопротивления и теплопроводности ванадия в диапазоне давлений 20–60 ГПа.

### 2. Измерение электросопротивления ударно-сжатых образцов ванадия

#### 2.1. Образцы и измерительная ячейка

Исследуемые образцы изготавливались из ванадиевой фольги марки ВнПл-2. Согласно техническим условиям (ТУ 48-4-373-76), ванадиевая фольга ВнПл-2 содержит контролируемые примеси в количестве не более 0.25 % Fe, 0.3 % Al, 0.3 % Si, 0.02 % N, 0.001 H, 0.05 % O, 0.04 % C. Из участка ванадиевой фольги формировался зигзагообразный ленточный образец. Ширина  $a_0$  и толщина  $h_0$  ванадиевых образцов  $a_0$  составляли  $a_0 = 1.2–1.5$  мм и  $h_0 = 0.06–0.08$  мм. В начальном состоянии материал образцов представлял поликристаллический ванадий с объемно-центрированной кристаллической (ОЦК) решеткой.

Элементы измерительной ячейки образца обозначены цифрами 1–3 на рис. 1. Здесь к концам ленточного образца 1 точечной сваркой подсоединялись тоководы 2 в виде полосок медной фольги толщиной 0.015 мм и шириной 3 мм. Плоскость ленточного образца располагалась параллельно плоскости фронта ударной вол-



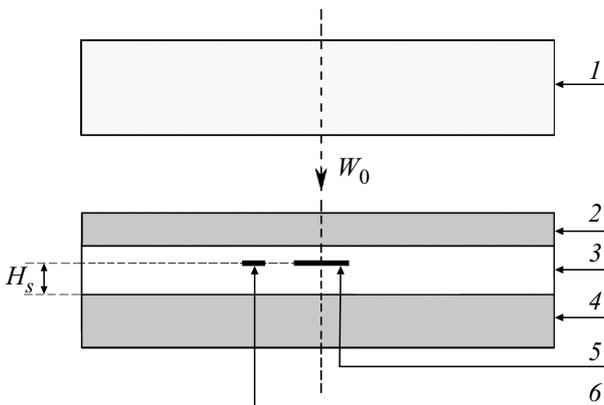
**Рис. 1.** Измерительная ячейка: 1 — ванадиевый образец, 2 — медные тоководы, 3 — контакты медь-ванадий, 4 — чувствительный элемент манганинового датчика давления, 5 — медные тоководы.

ны. В этой же плоскости располагалась измерительная ячейка манганинового датчика 4, 5. То есть ячейка манганинового датчика представляла собой аналог измерительной ячейки образца, в которой ванадиевый образец заменен ленточным образцом манганина.

Начальные электрические сопротивления  $R_0$  ленточных ванадиевых и манганиновых образцов измерялись предварительно для каждого эксперимента и составляли для ванадия  $\approx 0.5 \Omega$  и для манганина  $\approx 1.5 \Omega$ .

## 2.2. Генератор ступенчато-циклического ударно-волнового нагружения

В работе была проведена серия ударно-волновых экспериментов по измерению *in situ* электросопротивления ударно-сжатых ванадиевых образцов с использованием генератора ступенчато-циклического ударно-волнового нагружения, представленного на рис. 2. Здесь металлический плоский ударник 1 разгоняется продуктами взрыва до скорости  $W_0$ . Мишень представляет собой



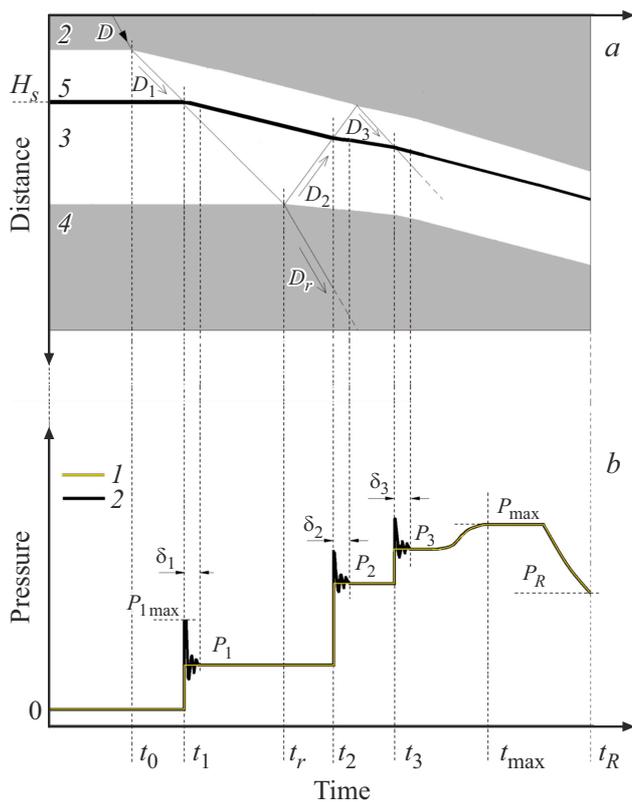
**Рис. 2.** Генератор ступенчато-циклического ударно-волнового нагружения: 1 — пластинчатый металлический (нержавеющая сталь 18-8) ударник толщиной 3.5 мм со скоростью  $W_0 = 2.63 \text{ km/s}$ ; 2 — стальная (сталь 18-8) пластина толщиной 1.85 мм; 3 — набор тефлоновых пленок с общей толщиной 2.34 мм; 4 — стальная (сталь 18-8) пластина толщиной 4.08 мм;  $H_s = 1.12 \text{ mm}$  — местоположение ванадиевого образца 5 и манганинового датчика давления 6.

ударные наковальни из двух „жестких“ металлических пластин 2 и 4, между которыми расположен „мягкий“ слой изолятора 3. Изолятор 3 является набором тефлоновых пленок, склеенных вакуумной смазкой. Тефлоновая пленка — это неориентированная фторопластовая лента толщиной 0.1–0.5 мм. Тонкий (по сравнению с толщиной изолятора) ленточный исследуемый образец 5 размещен в изоляторе так, что его середина располагается на расстоянии  $H_s$  от поверхности пластины 4. В этой же плоскости расположен ленточный манганиновый датчик давления 6. Вариация расстояния  $H_s$  осуществлялась путем нужного набора тефлоновых пленок, склеенных микронными слоями вакуумной смазки. В подписи к рис. 2 приведены характеристики пластин обсуждаемого далее оптимального эксперимента проведенной серии.

Функционирование используемого генератора ударно-волнового нагружения поясняется на рис. 3. Предварительно остановимся на хорошо известной схеме ступенчатого ударно-волнового сжатия, рассматривая траектории возмущений в координатах расстояние–время (см. рис. 3, а) во взаимосвязи с профилем давления  $I$  (см. рис. 3, б) в лагранжевой частице  $H_s$  образца, состоящего не из „жесткого“ металла, а из тефлона.

На рис. 3, а стрелкой с символом  $D$  обозначена траектория однократной ударной волны, образовавшейся после соударения ударника с пластиной 2. В момент  $t_0$  происходит распад разрыва на границе металл 2–тефлон 3, после чего в изоляторе 3 распространяется первая ударная волна со скоростью  $D_1$  и с давлением  $P_1$  за ее фронтом. В момент  $t_r$  на границе раздела тефлон 3–металл 4 образуются две ударные волны  $D_2$  и  $D_r$  с амплитудами  $P_2$ . Ударная волна  $D_2$  отражается от пластины 2 ударной волной  $D_3$  с давлением  $P_3$  за ее фронтом.

В дальнейшем цикл формирования ступеней  $P_1$ – $P_3$  с амплитудами четвертой и последующих ступеней  $P_{3+i}$  повторяется. При этом амплитуды  $P_{3+i}$  по мере приближения времени к некоторому моменту  $t_{\max}$  стремятся к максимальной величине давления  $P_{\max}$ , которая определяется величиной скорости ударника и свойствами пластин 2, 3, 4. Эта стадия схематически показана плавным участком профиля  $I$  при давлениях  $P_3 < P < P_{\max}$  на рис. 3, б. В итоге в плоскости  $H_s$  расположения образца формируется профиль давления, обозначенный цифрой 1 на рис. 3, б. Представленный генератор предусматривает также образование стадии уменьшения давления в образце за счет волн разгрузки от тыльной стороны ударника и от свободной поверхности пластины 4. Эта стадия протекает при временах, превышающих  $t_{\max}$ . В данной работе разгрузка рассматривается лишь до момента  $t_R$  и давления  $P_R$  в волне разгрузки от тыльной стороны ударника. Таким образом, в итоге в плоскости  $H_s$  расположения образца формируется профиль давления, обозначенный цифрой 1 на рис. 3, б.



**Рис. 3.** Функционирование генератора ступенчато-циклического ударного нагружения: (а) — кинематика ударных волн в координатах расстояние—время, смысл обозначений 2, 3, 4, 5,  $H_s$  — тот же, что и на рис. 2; (б) — Схема профиля давления (зависимость от времени) в плоскости  $H_s$  исследуемого образца. 1 — профиль давления простого ступенчатого ударного сжатия, 2 — профиль давления ступенчато-циклического ударного сжатия. Остальные обозначения на рис. 3, а и 3, б объяснены в тексте.

Рассмотрим теперь ступенчато-циклический профиль давления (см. 2 на рис. 3, б), когда образец 5, изготовлен из „жесткого“ металла. В этом случае в момент  $t_1$  прихода волны  $D_1$  на тыльную поверхность образца 5 в нем стартует ударная волна с давлением  $P_{1\max}$ . После выхода этой волны на фронтальную границу образца с изолятором в образце начинается реверберация волн сжатия и разгрузки. Реверберация длится в течение времени  $\delta_1$  и заканчивается достижением в образце давления  $P_1$ . Аналогичные события происходят и после момента  $t_2$  прихода волны  $D_2$  на образец, когда в нем начинается новая реверберация волн. Эта реверберация длится в течение времени  $\delta_2$  и заканчивается достижением в образце давления  $P_2$ . Наконец, приход ударной волны  $D_3$  стимулирует аналогичную реверберацию волн в образце в течение времени  $\delta_3$ . Реверберация  $\delta_3$  заканчивается образованием в образце третьей ступени давления  $P_3$  и так далее. В дальнейшем возникают реверберации  $\delta_i$  на фронтах последующих ступеней.

Отметим, что полупериод  $\tau_0$  циклической составляющей  $\delta$  определяется величиной порядка  $\tau_0 \sim h_0/C_0$ ,

где  $h_0$  — толщина образца,  $C_0$  — скорость звука в материале образца. При типичных значениях для металлических образцов  $h_0 \sim 0.05$  мм и  $C_0 \sim 5$  мм/мкс величина  $\tau_0$  равна  $\tau_0 \sim 10$  нс. Иными словами, реверберации волн сжатия в тонком „жестком“ образце в окружении „мягкого“ изолятора привносят в профиль давления каждой ступени ударного сжатия субмикросекундную циклическую составляющую. В итоге в плоскости  $H_s$  исследуемого образца формируется профиль давления, обозначенный цифрой 2 на рис. 3, б.

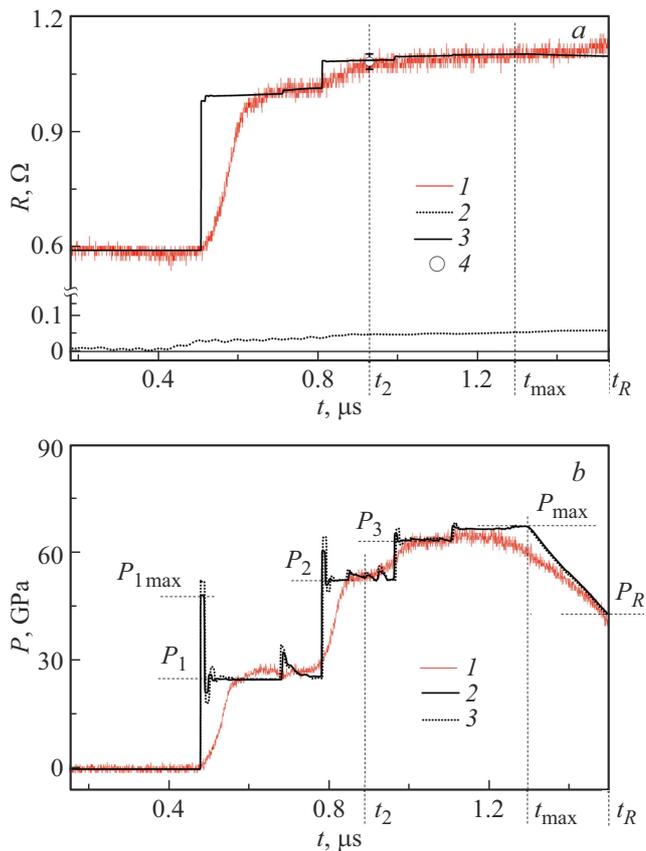
Таким образом, используемый генератор стимулирует в исследуемом образце ступенчатое ударно-волновое нагружение, включающее субмикросекундную циклическую составляющую давления на фронте каждой ступени и последующее плавное уменьшение давления.

### 2.3. Профили электросопротивления и давления ударно-сжимаемых образцов ванадия

Во время ударно-волнового нагружения вдоль ленточных образцов ванадия и марганца пропускались постоянные токи  $J_0 = 3.0(1)$  А от независимых источников тока. Измерения изменений электросопротивления образца и марганцевого датчика проводились по двухточечной схеме с использованием моста Уитстона, содержащего соответствующую измерительную ячейку (см. рис. 1) в качестве измеряемого сопротивления. Изменение сопротивления измерительной ячейки  $\Delta R$  рассматривалось как сумма  $\Delta R = \Delta R_1 + \Delta R_2 + \Delta R_3$  изменений сопротивлений ванадиевого образца  $\Delta R_1$ , медных тоководов  $\Delta R_2$ , и двух контактных сопротивлений медь-образец  $\Delta R_3$ .

Первичной экспериментальной информацией являлись профили (зависимости от времени  $t$ ) изменения напряжения разбалансировки моста  $\Delta U = \Delta U(t)$ , которые регистрировались высокочастотным осциллографом Tektronix DPO4104В. Профили  $\Delta U(t)$  пересчитывались в изменения электросопротивления измерительной ячейки по формуле  $\Delta R = k\Delta U$ , где  $k$  предварительно определяемый калибровочный коэффициент.

В связи с тем, что профиль  $\Delta R = \Delta R(t)$  содержит паразитные сопротивления  $\Delta R_2$  и  $\Delta R_3$ , не имеющие отношения к изменению электросопротивления исследуемого образца, были проведены сопутствующие эксперименты, целью которых являлась оценка суммарной величины изменения электросопротивлений  $\Delta R_2 + \Delta R_3$ . Для этого измерялись профили  $\Delta U = \Delta U(t)$  низкоомной измерительной ячейки, которая изготавливалась из тех же элементов, показанных на рис. 1, и отличаясь только малой длиной и, следовательно, малым сопротивлением ванадиевого образца. Начальные электросопротивления элементов измерительных ячеек составляли: для исследуемого образца  $\approx 0.5$   $\Omega$ , для образца низкоомной ячейки  $\approx 15$  м $\Omega$ , для медных тоководов  $\approx 40$  м $\Omega$ , для каждого контактного сопротивления медь-образец  $\approx 1$  м $\Omega$ .



**Рис. 4.** Электросопротивление и давление в образце ванадия при ступенчато-циклическом ударном сжатии: (а) 1 — экспериментальный профиль  $R = R(t)$  электросопротивления измерительной ячейки, 2 — экспериментальный профиль электросопротивления низкоомной измерительной ячейки, 3 — модельный профиль  $R_{\text{mod}} = R_{\text{mod}}(t)$  электросопротивления ванадиевого образца, 4 — разброс амплитуд нескольких экспериментальных профилей  $R = R(t)$  в момент  $t_2$  при давлении  $P_2$ , (б) 1 — показания манганинового датчика в виде профиля давления, 2 — модельный профиль давления  $P = P(t)$  в ванадиевом образце, смысл обозначений  $P_1$ ,  $P_{1\text{max}}$ ,  $P_2$ ,  $P_3$ ,  $P_{\text{max}}$ ,  $P_R$ , и  $t_2$ ,  $t_{\text{max}}$ ,  $t_R$  тот же, что и на рис. 3, б; 3 — модельный профиль давления в чувствительном элементе манганинового датчика.

Эксперименты показали, что амплитуда профиля суммарного сигнала  $\Delta R$  превышает величину изменения электросопротивлений  $\Delta R_2 + \Delta R_3$  более чем на порядок. На этом основании паразитный вклад составляющих  $\Delta R_2$  и  $\Delta R_3$  считали незначительным и, соответственно, экспериментальный профиль электросопротивления ванадиевого образца  $R = R(t)$  вычислялся как  $R = R_0 + \Delta R$ , где  $R_0$  его начальное электросопротивление. Один из типичных экспериментальных профилей серии  $R = R(t)$  представлен графиком 1 на рис. 4, а. На этом же рисунке для сравнения показан сигнал 2 низкоомной ячейки. Величины других осложняющих эффектов, таких как шунтирование, скин-эффект, теплообмен тонких металлических образцов с окружающим изолятором рассмотрены в работе [5].

На рис. 4, б, представлены профили давления в чувствительных элементах измерительной ячейки. Так как манганиновый датчик имеет такую же толщину и располагается в той же плоскости, что и образец, то его показания изменяются синхронно с изменением электросопротивления образца. Поэтому показания манганинового датчика могут служить в качестве индикатора времени прихода ударно-волновых возмущений не только на манганиновый датчик, но и на исследуемый образец. Кроме этого, первичный сигнал манганинового датчика, будучи пересчитанным в профиль давления (см. 1 на рис. 4, б), может быть использован для экспериментальной идентификации ступенчатого профиля ударно-волнового сжатия ванадиевого образца. Что же касается количественного профиля давления в ванадиевом образце, то этот профиль рассчитывался согласно процедуре, представленной в следующем разделе. Модельный профиль давления в ванадиевом образце для выполненного эксперимента представлен на рис. 4, б графиком 2.

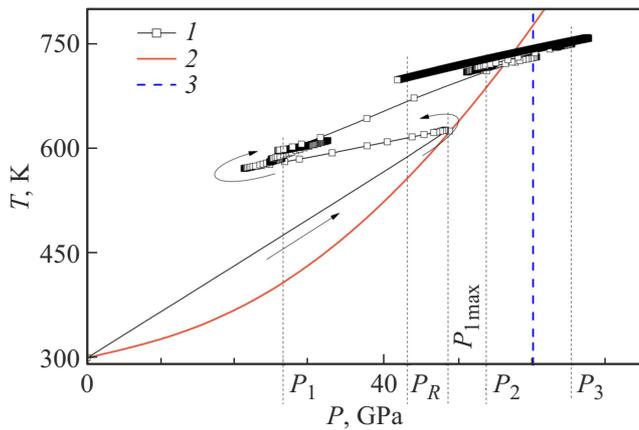
Заметим для дальнейшего, что модельный профиль 3 давления в манганиновом образце на рис. 4, б подобен модельному профилю 2 давления в ванадиевом образце в том отношении, что содержит циклическую составляющую на каждой ступени, в то время как на экспериментальном профиле 1 циклическая составляющая не фиксируется. Это различие профилей 1 и 3 обусловлено ограниченной частотной характеристикой используемой методики измерения электросопротивления, которая составляет  $\approx 100$  МГц.

### 3. Реконструкция объемно-температурной зависимости удельного электросопротивления ванадия при высоких давлениях и температурах

Объемно-температурные зависимости удельного электросопротивления ванадия при высоких давлениях и субмикросекундных временах были реконструированы в результате совместного моделирования истории термодинамического состояния и синхронного изменения электросопротивления ванадиевых образцов в условиях ступенчато-циклического ударного нагружения.

#### 3.1. Моделирование термодинамического состояния ванадия в условиях ступенчато-циклического ударно-волнового нагружения

Моделирование термодинамического состояния ванадия в проведенных экспериментах осуществлялось в гидрокоде, опирающемся на ранее разработанные авторские уравнения состояния. Для ванадия использовалось уравнение состояния объемно-центрированной (ОЦК) фазы



**Рис. 5.** Экспериментально исследованная область фазовой диаграммы ванадия в координатах температура  $T$  — давление  $P$ :  $1$  — фазовая траектория ванадия при ступенчато-циклическом ударном нагружении, стрелками обозначены последовательности  $TP$  состояний ванадия во время процесса ступенчато-циклического ударного нагружения;  $2$  — расчетная ударная адиабата однократного ударного сжатия ванадия из работы [6];  $3$  — линия равновесия между ОЦК и ромбоэдрической фазами ванадия из [8];  $P_{1\max}$ ,  $P_1$ ,  $P_2$ ,  $P_3$ ,  $P_R$ , те же, что и на рис. 4,  $b$ .

этого металла из работы [6]. Ссылки на работы с уравнениями состояния остальных материалов содержатся в статье [5]. При моделировании термодинамического состояния ванадия учитывались его упруго-пластические свойства в форме зависимости предела текучести  $Y$  от объема  $Y = Y(V)$  в рамках модели упругопластического твердого тела. В качестве  $Y = Y(V)$  использованы данные табл. I из работы [7] при постоянном значении модуля сдвига ванадия  $G = 55.2$  ГПа.

Так как ширина ленточного ванадиевого образца  $a_0$  на порядок превышала его толщину  $h_0$ , то в гидрокоде исследуемый образец моделировался пластиной с начальной толщиной  $h_0$ . Используемый гидрокод позволяет рассчитывать волновые взаимодействия и термодинамические состояния образца в форме зависимостей от времени (профилей) давления  $P(t)$ , температуры  $T(t)$  и удельного объема  $V(t)$  для любой лагранжевой частицы каждой пластины многослойной мишени взрывного генератора при плоском одномерном ударно-волновом нагружении. Соответственно в работу принимались расчетные профили  $P(t)$ ,  $T(t)$  и  $V(t)$  для лагранжевой координаты  $H_S$ , относящейся к середине ванадиевой пластины. Модельный профиль давления  $P(t)$  для конкретного эксперимента показан, как упоминалось выше, графиком 2 на рис. 4,  $b$ .

Исключение времени из расчетных профилей  $P(t)$  и  $T(t)$  дает фазовую траекторию в координатах давление-температура в каждом эксперименте. На рис. 5 графиком 1 показана фазовая траектория (термодинамическая история) ступенчато-циклического сжатия в эксперименте со значением  $W_0 = 2.63$  км/с. Прокомментируем здесь расположение расчетной траектории 1

на фоне предыдущих результатов по ударному сжатию ванадия из работ [6–8]. Как видно, первая ударная волна  $P_{1\max} = 49$  ГПа ступенчато-циклического нагружения переводит ванадий в состояние, в котором согласно [7] динамический предел текучести этого металла близок к нулевым. Соответственно значение  $P_{1\max}$  лежит практически на ударной адиабате однократного ударного сжатия 2 ванадия из [6]. Видно также, что протяженный участок модельной траектории 1 располагается в области существования ОЦК фазы ванадия, то есть слева от линии равновесия 3 [8].

Таким образом, результаты моделирования термодинамического состояния ударно-сжатого ванадия позволяют обозначить экспериментально исследованную область фазовой диаграммы ОЦК ванадия в диапазоне температур 580–730 К и давлений 20–60 ГПа.

### 3.2. Моделирование объемно-температурной зависимости удельного электросопротивления ванадия

В качестве модели объемно ( $V$ ) — температурной ( $T$ ) зависимости удельного электросопротивления  $\rho = \rho(V, T) \propto \rho_0 \varphi \varepsilon$  было использовано соотношение в виде произведения начального удельного электросопротивления  $\rho_0 = \rho(V_0, T_0)$  и двух функций: объемной составляющей  $\varphi = \varphi(V)$  и температурной составляющей  $\varepsilon = \varepsilon(T)$ .

В качестве прототипа объемной составляющей  $\varphi = \varphi(V)$  взята степенная функция из работы [9], характеризующая величиной показателя  $n$ . Функциональный вид  $\varphi = \varphi(V)$  из [9] был модифицирован согласно данным работы [10] и в дальнейшем использован в работе [11], а также в настоящей работе в виде

$$\varphi = \left(\frac{V}{V_0}\right)^{n/3} \left(\frac{v_0 - V}{v_0 - V_0}\right)^{-2n}, \quad (1)$$

где  $v_0$  — индивидуальный параметр металла,  $V_0$  — его удельный объем при комнатной температуре  $T_0$  и атмосферном давлении  $P_0$ , Параметры  $v_0$  и  $V_0$  являются известными параметрами уравнений состояния. Для ванадия они взяты из работы [6] и приведены в таблице. Параметр  $n$  имеет тот же смысл, что и в прототипе [9]. Величина коэффициента  $n$  определяется согласно [9] механизмом рассеяния электронов проводимости в металлах и, например, значение  $n = 2$  характерно для модели свободных электронов в идеальном металле.

Ранее в работе [11] для температурной составляющей электросопротивления металла с насыщением использовалась эмпирическая функция  $\varepsilon = x / (\exp(x) - 1)$ , где  $x = \theta_\varepsilon / T$ ,  $\theta_\varepsilon$  — подгоночный коэффициент. Однако применительно к ванадию понадобился второй подгоночный параметр. В результате для ванадия принято выражение  $\varepsilon = \varepsilon(T)$  с двумя подгоночными параметрами  $\alpha$  и  $\theta_\varepsilon$  в виде

$$\varepsilon = T^\alpha / \exp\left(\frac{\theta_\varepsilon}{T}\right). \quad (2)$$

Коэффициенты модельных функций для электросопротивления и теплопроводности ОЦК–ванадия

Vanadium	$\rho_0, \mu\Omega \cdot \text{cm}$	$T_0, \text{K}$	$V_0, \text{cm}^3/\text{mol}$	$\nu_0, \text{cm}^3/\text{mol}$	$n$	$\alpha$	$\theta_\varepsilon, \text{K}$	$\varepsilon_0$	$k_{0l}, \text{W/mK}$
<i>bcc-V</i>	20.21	300.0	8.35	29.507	2.0	0.63	145(2)	22.42	3.7

С учетом (1) и (2) модельное соотношение для объемно-температурной зависимости удельного электросопротивления  $\rho = \rho(V, T)$  металла с насыщением электросопротивления приобретает вид

$$\rho = \rho_0 \varphi \varepsilon / \varepsilon_0, \quad (3)$$

где  $\rho_0 = \rho(V_0, T_0)$  — удельное электросопротивление материала при атмосферном давлении, объеме  $V_0$  и температуре  $T_0$ ,

$$\varepsilon_0 = T_0^\alpha / \exp\left(\frac{\theta_\varepsilon}{T_0}\right).$$

Таким образом, в терминах модели (3) объемно-температурная зависимость электросопротивления с насыщением характеризуется постоянной величиной начального удельного электросопротивления металла  $\rho_0$  и тремя подгоночными параметрами:  $\alpha$ ,  $\theta_\varepsilon$  и  $n$ .

### 3.3. Определение параметров модели насыщения удельного электросопротивления ванадия при высоких давлениях и температурах

Заметим, что при атмосферном давлении изменение объема ванадия невелики и поэтому параметры температурной составляющей  $\alpha$  и  $\theta_\varepsilon$  могут быть определены с опорой на экспериментальную температурную зависимость электросопротивления ванадия. Так, например, аппроксимация экспериментальной атмосферной изобары удельного электросопротивления ванадия [4] с помощью (3) при  $V = \text{const} = V_0$ ,  $\rho_0 = 20.21 \mu\Omega \cdot \text{cm}$ ,  $T_0 = 300 \text{ K}$  дает значения  $\alpha = 0.680(3)$  и  $\theta_\varepsilon = 145(2) \text{ K}$ . Эти значения вместе с коэффициентом детерминации  $R^2 = 0.99997$  найдены методом наименьших квадратов. Соответствующий модельный график (3) обозначен цифрой 1 на рис. 6, а. Как видно, график 1 с высокой точностью согласуется с экспериментом [4] в широком диапазоне температур.

Для определения подгоночного параметра  $n$  требуются опорные данные не только при сильном изменении температуры, но и при существенном изменении объема ванадия. Такими данными могут служить представленные выше профили электросопротивления  $R = R(t)$  образцов ударно-сжатого ванадия. В этом случае алгоритм подбора искомого значения подгоночных параметров заключается в следующем. Сначала на основе (3) формулируется выражение для модельного профиля электросопротивления ударно-сжимаемого образца

$R_{\text{mod}} = R_{\text{mod}}(t)$  в условиях плоского одномерного сжатия в виде

$$R_{\text{mod}} = \left(\frac{R_0}{\varepsilon_0}\right) \left(\frac{V_0}{V}\right) \varphi \varepsilon, \quad (4)$$

где  $R_0$  — начальное электросопротивление образца при комнатной температуре  $T_0 = 300 \text{ K}$  и атмосферном давлении  $P_0$ , множитель  $(V_0/V)$  учитывает изменение толщины плоского образца при плоской одномерной деформации. Остальные множители в (4) те же, что и в соотношении (3). Подстановка полученных выше модельных профилей температуры  $T = T(t)$  и объема  $V = V(t)$  в (4) дает модельный профиль  $R_{\text{mod}} = R_{\text{mod}}(t)$ , зависящий от параметров  $\alpha$ ,  $\theta_\varepsilon$ ,  $n$ , содержащихся в (3). После этого подбором „вручную“ находят такие значения свободных параметров, при которых модельный профиль электросопротивления ударно-сжимаемого ванадиевого образца  $R_{\text{mod}} = R_{\text{mod}}(t)$  оказывается максимально близким к экспериментальному  $R = R(t)$ .

Реализация этого алгоритма представлена графиком 3 на рис. 4, а. Согласование модельного профиля с экспериментальным достигалось за счет вариации  $\alpha$  и  $n$  при неизменном значении  $\theta_\varepsilon = 145 \text{ K}$ . Оптимальные значения искомого параметров оказались следующими:  $\alpha = 0.63$  и  $n = 2.0$ . Как видно на рис. 4, а отклонение модельного профиля 3 от экспериментального 1 не превышает 2%.

Оговоримся здесь, что подобно модельным профилям давления на рис. 4, б можно было ожидать сильных субмикросекундных пиков на фронтах модельного ступенчатого профиля электросопротивления 3 на рис. 4, а. Однако фронты ступеней модельного профиля 3 не содержат этой особенности. Отсутствие циклической компоненты на фронтах ступеней профиля 3 обусловлено компенсацией конкурирующих вкладов объемной  $\varphi = \varphi(V)$  и температурной  $\varepsilon = \varepsilon(T)$  составляющих электросопротивления в соотношении (4).

Возвращаясь к определению подгоночных параметров, отметим, что величина параметров  $\alpha$  и  $n$  определена подгонкой модельного профиля  $R_{\text{mod}} = R_{\text{mod}}(t)$  под единственный экспериментальный профиль. Поэтому оценим разброс значений  $\alpha$  и  $n$ , обусловленный разбросом экспериментальных профилей  $R = R(t)$ . Оценку величины этого эффекта сделаем на основе разброса амплитуд нескольких профилей  $R = R(t)$  идентичных экспериментов в момент  $t_2$  при давлении  $P_2$ , обозначенный точкой 4 на рис. 4, а. С этой целью рассчитаем ряд профилей  $R_{\text{mod}} = R_{\text{mod}}(t)$  при различных значениях  $\alpha$  при постоянном значении  $n = 2.0$ . Оказывается, что при вариации  $\alpha$  в пределах  $\alpha = 0.62-0.64$  модельные профили, сохраняя свою форму, по амплитуде не выходят за границы,

обозначенные точкой 4. Этот же прием был применен для оценки разброса  $n$  в пределах  $n = 1.9–2.1$  при постоянном значении  $\alpha = 0.63$ . При вариации этого параметра изменения профилей  $R_{\text{mod}} = R_{\text{mod}}(t)$  не превышали 1%.

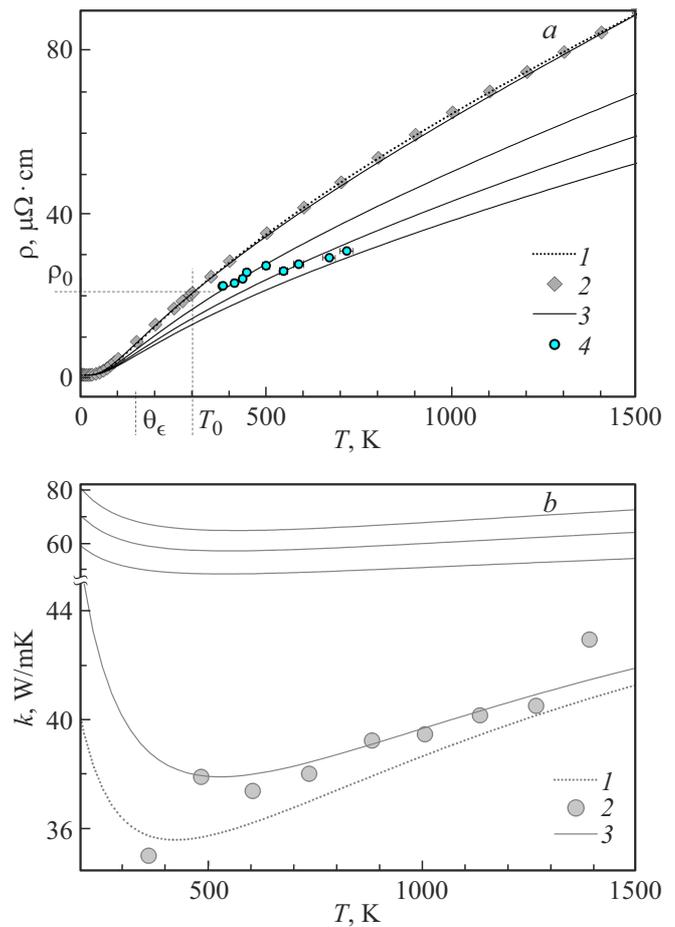
Полный комплект параметров для модели с насыщением объемно-температурной зависимости электросопротивления ванадия при высоких давлениях и температурах в форме (3) представлен в таблице.

#### 4. Обсуждение результатов

Как отмечалось выше, согласно данным работы [7] ванадий проявляет упругопластическое поведение при ударно-волновом нагружении. Поэтому, учитывая хорошо известный факт необратимого изменения электрического сопротивления металлов из-за образования дефектов при пластической деформации, необходимо обсудить правомерность модели (3) применительно к ванадию в условиях проведенного эксперимента. Действительно, в соотношениях (1)–(3) подразумевается, что изменение удельного электросопротивления металла зависит только от объема и температуры. Тем самым предполагается, что, во-первых, объемно-температурное изменение удельного электросопротивления металла обратимо и, во-вторых, величина обратимого изменения электросопротивления превалирует над его необратимой составляющей, обусловленной пластической деформацией. Рассмотрим аргументы в пользу правомерности такого приближения.

На рис. 6, *a* представлена модельная атмосферная изобара удельного электросопротивления  $\rho = \rho(V(T, P_0), T)$ , рассчитанная с использованием параметров таблицы и с учетом изменения объема ванадия при нагревании. Как видно модельная атмосферная изобара практически не отличается от аппроксимации 1 статических экспериментальных данных 2, которые получены при отсутствии пластической деформации образцов. Таким образом, найденные параметры  $n$  и  $\theta_\epsilon$  оказываются применимы не только к пластически деформированному ванадию вдоль его фазовых траекторий ударного нагружения, но и вдоль высокотемпературной атмосферной изобары ванадия в статических условиях, где пластическая деформация отсутствует. Этот факт оправдывает пренебрежение изменением электросопротивления ванадия из-за пластической деформации при плоском одномерном ударном сжатии.

Разумность предположения об обратимости объемно-температурного изменения удельного электросопротивления ударно-сжатого ванадия поддерживается объяснением различия электросопротивления образцов ванадия на рис. 4, *a* при сжатии и разгрузке. Действительно, как видно совпадающие амплитуды экспериментального 1 и модельного 3 профилей электросопротивления увеличиваются по мере увеличения давления до  $P_{\text{max}}$ , но почти не изменяются при временах  $t_{\text{max}} < t < t_R$ ,



**Рис. 6.** Высокотемпературные изобары удельного электросопротивления и теплопроводности ванадия: (a) 1 — аппроксимация атмосферной изобары  $\rho = \rho(V_0, T)$ , 2 — рекомендуемые экспериментальные значения для атмосферной изобары из статьи [4], 3 — модельные изобары удельного электросопротивления (3) ванадия  $\rho = \rho(V, T)$  при различных давлениях (сверху вниз) 0.0, 20.0, 40 и 60.0 GPa, 4 — эксперимент [12]; (b) 1 — модельная изобара электронной составляющей теплопроводности  $k_e$ , 2 — экспериментальные данные [13], 3 — модельные изобары коэффициента теплопроводности (5) при различных давлениях (снизу вверх) 0.0, 20.0, 40 и 60.0 GPa.

когда давление существенно уменьшается в волне разгрузки от  $P_{\text{max}}$  до  $P_R$ . С позиций модели (3) это различие объясняется уже упоминавшимся выше учетом конкурирующих вкладов объемной составляющей (1) и составляющей (2) с насыщением по температуре, использующих единый комплекта параметров модели  $\theta_\epsilon$ ,  $\alpha$  и  $n$ . Таким образом, факт совпадения модельных и экспериментальных профилей электросопротивления на рис. 4, *a* свидетельствует в пользу того, что электросопротивление ударно-сжатого ванадия обратимо по отношению к изменениям объема и температуры, происходящих как при сжатии, так и при разгрузке.

Предлагаемое модельное описание объемно-температурной зависимости удельного электросопротивления

ванадия в сочетании с его уравнением состояния позволяет производить расчеты электросопротивления этого металла в различных участках его фазовой диаграммы. На рис. 6, *a* представлены расчетные изобары 3 при гигапаскальных давлениях и тысячеградусных температурах. Как видно, графики 3 на рис. 6, *a* в согласии с (3) имеют *s*-образный характер температурной зависимости удельного электросопротивления, что свидетельствует об эффекте насыщения удельного электросопротивления ванадия не только при атмосферном давлении, но и при повышении давления до десятков гигапаскалей.

Сравним теперь результаты наших модельных и литературных экспериментальных ударно-волновых экспериментов. На рис. 6, *a* точками 4 представлены экспериментально-расчетные результаты по удельному электросопротивлению ударно-сжатого ванадия из TABLE I работы [12]. Как видно точки 4 закономерно располагаются среди наших модельных изобар 3. Эта закономерность выражается в том, что по мере повышения соответствующих давлений в работе [12] от 17 до 50 GPa точки 4 поочередно располагаются практически на наших модельных изобарах 3

Таким образом, в целом качественное и количественное согласие модельных результатов с нашими экспериментальными результатами и экспериментом [12] по объемно-температурной зависимости электросопротивления ванадия поддерживает предположение о сохранении эффекта насыщения удельного электросопротивления ванадия при высоких давлениях.

Рассмотрим теперь использование полученных результатов применительно к модельным расчетам объемно-температурной зависимости электронной составляющей коэффициента теплопроводности ванадия на основе закона Видемана–Франца  $k_e = LT/\rho$  при теоретическом значении  $L$  для вырожденного электронного газа  $L = \text{const} = 2.45 \cdot 10^{-8} \text{ W}\Omega/\text{K}^2$  и решеточной составляющей теплопроводности Дугдала–МакДональда  $k_l$ .

Расчет  $k_e$  с использованием параметров таблицы и уравнения состояния выполнен вдоль высокотемпературной атмосферной изобары ванадия и представлен графиком 1 на рис. 6, *b*. На этом же рисунке приведены экспериментальные данные 2 из работы [13]. Как видно, график 1 располагается существенно ниже эксперимента 2. Однако оказывается, что это различие можно нивелировать, если подобно [11] учесть вклад объемно-температурной зависимости решеточной теплопроводности  $k_l$ .

Действительно, запишем полное выражение для объемно-температурной зависимости теплопроводности ванадия  $k = k(V, T)$  в виде суммы

$$k = k_e + k_l, \quad (5)$$

где, как и выше,  $k_e = LT/\rho$  является электронной составляющей теплопроводности, рассчитанной по закону Видемана–Франца с  $L = \text{const} = 2.45 \cdot 10^{-8} \text{ W}\Omega/\text{K}^2$ , а второе слагаемое представляет модельное выражение

объемно-температурной зависимости решеточной теплопроводности Дугдала–МакДональда  $k_l = k_l(V, T)$

$$k_l = k_{0l} \left( \frac{T_0}{T} \right) \left( \frac{V}{V_0} \right) \left( \frac{\Theta}{\Theta_0} \right)^3 \left( \frac{\gamma_0}{\gamma} \right)^2. \quad (6)$$

Функции

$$\Theta = \Theta_0 \left( \frac{v_0 - V}{v_0 - V_0} \right)^2 \left( \frac{V_0}{V} \right)^{2/3}$$

и

$$\gamma = \frac{2}{3} + \frac{2V}{v_0 - V},$$

а также  $\gamma_0 = \gamma(V_0)$  в (6) содержат подобно данным работы [11] известные параметры  $v_0$  и  $V_0$ . Для ванадия эти параметры приведены в таблице. Параметр  $k_{0l}$  является подгоночным параметром, предназначенным для согласования модельных расчетов (5) с экспериментом из работы [13]. На рис. 6, *b* нижним графиком 3 представлен расчет  $k = k(V, T)$  по (5) вдоль атмосферной изобары с величиной всех параметров из таблицы. Как видно, в диапазоне температур 500–1300 K модельный расчет, учитывающий уравнение состояния ванадия, практически совпадают с экспериментальными данными 2 из работы [13].

Представляется, что возможность согласования модельных расчетов с литературными данными по коэффициенту теплопроводности при атмосферном давлении на рис. 6, *b* можно рассматривать как верификацию предлагаемой модели объемно-температурной зависимости удельного электросопротивления ванадия.

Подобно прогнозу для электросопротивления, был сделан прогноз изобар теплопроводности ванадия в диапазоне высоких давлений 20–60 GPa и температур 500–1300 K. Этот прогноз представлен верхними графиками 3 на рис. 6, *b*. Как видно, например, при температуре  $T = 700 \text{ K}$  эффект воздействия давления на коэффициент теплопроводности ванадия составляет  $\approx 0.45 \text{ W}/(\text{mK})$  на 1 GPa.

В заключение отметим, что экспериментальные данные по коэффициенту теплопроводности ванадия в исследованной нами области высоких давлений в доступной литературе не обнаружены. Поэтому расчеты объемно-температурной зависимости теплопроводности ванадия в области высоких давлений являются прогнозными.

## 5. Заключение

В условиях ступенчато-циклического ударного сжатия измерены электросопротивления образцов ОЦК полиморфной модификации ванадия в диапазоне давлений 20–60 GPa и температур 580–730 K

Разработана и верифицирована полуэмпирическая модель объемно-температурной зависимости удельного электросопротивления с насыщением по температуре ванадия при давлениях до десятков гигапаскалей и

до тысячеградусных температур. Показано, что эффект насыщения удельного электросопротивления ванадия, имеющий место при атмосферном давлении, сохраняется и при гигапаскальных давлениях.

Реконструирована объемно-температурная зависимость удельного электросопротивления ванадия в диапазоне давлений 20–60 GPa и температур 580–730 K.

Сформулирована полуэмпирическая трактовка закономерностей объемно-температурной зависимости теплопроводности ванадия при давлениях до десятков гигапаскалей и до тысячеградусных температур.

Дан количественный прогноз температурно-барической зависимости коэффициента теплопроводности ванадия в диапазонах давлений 0–60 GPa и температур 500–1300 K.

### Финансирование работы

Работа выполнена в рамках Госзадания № 124020600049-8.

### Конфликт интересов

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] В.Ф. Гантмахер. Электроны в неупорядоченных средах. Физматлит, М. (2013). 288 с.
- [2] B. Sundqvist. *J. Phys. Chem. Solids* **165**, 110686 (2022).
- [3] H. Inoue, S. Suehiro, K. Ohta, K. Hirose, Y. Ohishi. *Earth Planet. Sci. Lett.* **543**, 116357 (2020).
- [4] P.D. Desai, H.M. James, C.Y. Ho. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **13**, 1097 (1984).
- [5] А.М. Молодец, А.А. Гольшев. *Физика Земли* № 4, 39 (2024).
- [6] A.M. Molodets, A.A. Golyshev, D.V. Shakhrai. *J. Phys.: Conf. Series* **774**, 012008 (2016).
- [7] J.M. Foster, A.J. Comley, G.S. Case, P. Avraam, S.D. Rothman, A. Higginbotham, E.K.R. Floyd, E.T. Gumbrell, J.J.D. Luis, D. McGonegle, N.T. Park, L.J. Peacock, C.P. Poulter, M.J. Suggit, J.S. Wark. *J. Appl. Phys.* **122**, 025117 (2017).
- [8] D. Errandonea, S.G. MacLeod, L. Burakovsky, D. Santamaria-Perez, J.E. Proctor, H. Cynn, M. Mezouar. *Phys. Rev. B* **100**, 094111 (2019).
- [9] C.T. Seagle, E. Cottrell, Y. Fei, D.R. Huer, V.B. Prakapenka. *Geophys. Res. Lett.* **40**, 5377 (2013).
- [10] А.М. Молодец, А.А. Гольшев. *ЖТФ* **91**, 9, 1403 (2021).
- [11] А.М. Молодец, А.А. Гольшев, А.С. Савиных, Г.В. Гаркушин. *ФТТ* **66**, 10, 1763 (2024).
- [12] Y. Wang, J. Li, J. Gao, Y. Zhang, W. Song, B. Gan, Y. Zhang. *Phys. Rev. B* **111**, 134101 (2025).
- [13] Л.К. Воронин, А.Н. Меркульев, Б.Е. Неймарк. *Теплофизика высоких температур* **8**, 4, 780 (1970).

Редактор А.Н. Смирнов