

## ФИЗИКА И АСТРОФИЗИКА МАТЕРИЈЕ ПОД ВИСОКИМ ПРИТИСКОМ: НЕКИ РЕЗУЛТАТИ И НЕКИ ПРОБЛЕМИ

ВЛАДАН ЧЕЛЕБОНОВИЋ

*Институт за физику, Прегревица 118, 11080 Земун*

**Резиме.** Густина материјала јавља се као параметар у истраживањима у различитим областима физике и астрофизике, од експеримената са дијамантским пресама преко моделовања унутрашње структуре планета и звезда, до гравитационог колапса и раних етапа развоја висионе. У овом раду приказани су основни резултати истраживања материје под високим притиском, а указано је и на неке отворене проблеме. Посебна пажња посвећена је резултатима постигнутим у нашој земљи.

### 1. Увод

Посматрање небеских тела је једна од најстаријих активности људске врсте. У археолошким ископавањима, свуда по свету се наилази на документе (записе на папиру, пергменту, урезане у камену или глиненим плочицама, невешто насликане на зидовима пећина) којима су стари народи саопштавали своје посматрачке резултате. Квалитет и тачност тих посматрања били су, у многоме, лошији него данас, а основни циљ им је било успостављање и одржавање система за рачунање времена.

Савремени астрономи имају једну заједничку тачку са својим претходницима. Унутрашњост небеских тела била је и остала недоступна директном посматрању. Анализом зрачења које долази са неког небеског тела могу се одредити вредности његових параметара (пречник, маса, сјај, хемијски састав,...). Међутим, тако добијени резултати односе се на слојеве који су близу површине посматраних објеката. Физичке величине као што је, на пример,

температура у центру Урана нису доступне директном мерењу.

Упркос томе, модерна астрофизика има на располагању различите методе којима може да прикупи информације о унутрашњој структури објекта које истражује. Ти поступци се заснивају на теоријским и експерименталним резултатима постигнутим у проучавањима понашања материјала подвргнутих деловању високих притисака и температуре. Истраживања понашања материјала под високим притиском представљају данас научну област која се брзо развија, и којом се у свету бави велики број истраживача. О томе сведоче и чињенице да постоје европско (European High Pressure Research Group – EHPRG) и светско научно удружење (AIRAPT – International Association for the Advancement of High Pressure Science and Technology), а од пре неколико година и специјализован часопис из ове области (High Pressure Research).

Циљ овог рада је да прикаже неке резултате постигнуте у физици и астрофизици материје подвргнуте деловању високог притиска, као и да укаже на поједине отворене проблеме у овим областима. Просторна ограничења као и ширина области намећу потребу за селекцијом тема о којима ће бити речи, па отуд реч "неки" у наслову. Избор ће бити ограничен углавном на оне делове физике материјала под високим притиском са којима је аутор овог текста у свом досадашњем раду имао контакта.

Поред увода, текст садржи још два поглавља. Наредно је посвећено приказу савремених експерименталних метода које се користе у физици високих притисака, и њиховим астрономским применама, док се у трећем поглављу говори о теоријским радовима у овој области.

## 2. Експериментални методи

Притисак коме је неки физички систем подвргнут дефинише се као количник сile ( $F$ ) која на систем делује и његове површине ( $S$ ).

$$p = F/S \quad (1)$$

Јединица за мерење притиска у СИ систему је paskal; много чешће се у науци и свакодневном животу помиње bar (и kilobar као изведена јединица), који се користи за мерење притиска у ЦГС систему. Веза ових двеју јединица дата је релацијом  $1 \text{ GPa} = 10^4 \text{ bar} = 10 \text{ kbar}$ ; да подсетимо да је  $1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Nm}^{-2}$ .

Мерења притиска у свим типовима преса заснивају се на овој дефиницији. Постоје и тзв. ударни експерименти; њихов физички основ представља нагло ослобађање енергије (експлозијом или на неки други начин) у ограниченој запремини. Једначина (1) пружа увид и у основни проблем метрологије високог притиска: Како деловати што већом силом на дати узорак?

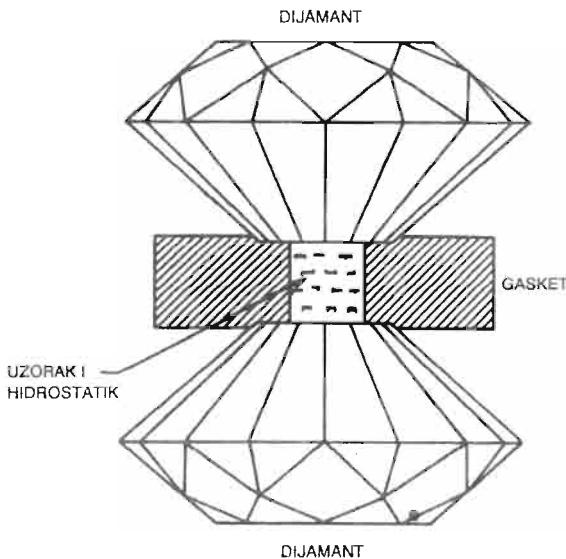
Почетком века (тачније, све до педесетих година) истраживачи су покушавали да пораст експериментално доступне области притиска остваре повећањем фактора  $F$  у (1). Овај приступ проблему има недостатак да димензије преса веома брзо постану исувише велике, што драстично компликује рад са њима. Најуспешнији истраживач у домену физике високих притисака у овом периоду

био је П. В. Бриџман (P. W. Bridgman) са Харвардског универзитета. Највиши притисак који је успео да постигне износио је око 100 kbar, а прикупио је обиље експерименталних података о електричној проводљивости и компресибилности материјала под високим притиском. Бриџманова сабрана дела (Bridgman, 1964) имају чак 7 томова, а за свој рад је 1946. добио Нобелову награду за физику.

Средином нашег века први пут се јавила идеја да би дијаманти могли да буду употребљени за компримовање узорака (Lawson and Tang, 1950). Посматрајући са временске дистанце од скоро пет деценија, чудно је да се таква идеја није јавила и много раније, пошто је дуго било познато да је дијамант најтврђа природна супстанца и да прогушта светлост и x - зраке. Тачан разлог је немогуће утврдити, али га можда треба тражити и у цени дијаманата.

После овог покушаја, који данас има искључиво историјски интерес, наступила је "тишина" до 1959. Тада су се појавила два међусобно независна типа дијамантских преса. Један тип, развијен на Универзитету у Чикагу, био је намењен за испитивања дифракције x – зрака на узорцима под притиском (Jamieson, Lawson and Nachtrieb, 1959). Други тип пресе разрађен је у Националном Бироу за Стандарде (НБС) САД и употребљаван је за мерења апсорпције инфрацрвеног зрачења у материјалима под притиском (Weir, Lippincott, Van Valkenburg et al, 1959). Данас се у експериментима користи чак 5 различитих типова дијамантских преса (нпр., Jayaraman, 1983); разлике међу њима потичу од разлика у начинима преноса силе на дијаманте и регулисања њихове међусобне оријентације.

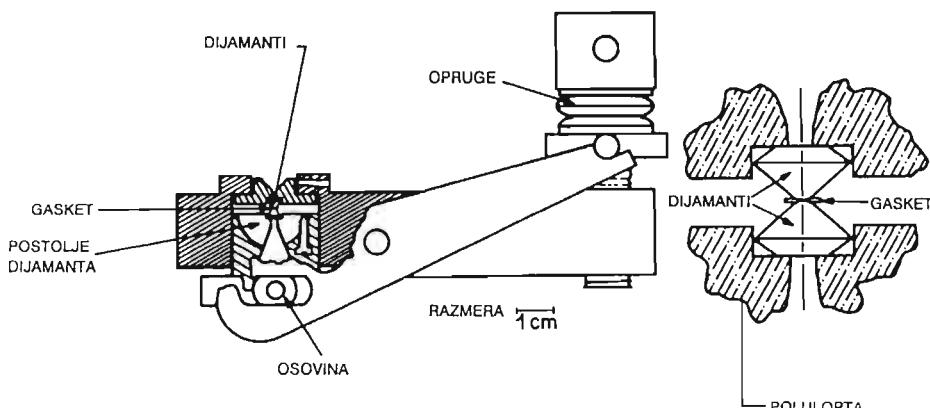
Принцип функционисања дијамантске пресе веома је једноставан и приказан је на слици 1.



Слика 1. Најважнији део пресе – дијаманти и гаскет.

Узорак се смешта између паралелних површи два супротстављена дијаманта. Притисак коме је подвргнут добија се деловањем механичке силе на спољашње површине дијаманата. Да би се узорак налазио под условима хидростатичког притиска, између дијаманата поставља се танка метална плочица, тзв. гаскет (Van Valkenburg, 1965). У центру гаскета се претходно направи слаб отисак дијаманта, а затим се у центру отиска пробуши рупа пречника око  $200\text{ }\mu\text{m}$ . У рупу се смештају узорак материјала који се испитује и зрнце рубина, а потом се она испуњава неким хидростатичким медијумом. Природа хидростатика зависи од области притиска у којој се врши мерење (Jayaraman, 1983); за вредности  $P \leq 20\text{ GPa}$  (или  $200\text{ kbar}$ ) најчешће се користи смеша метил и етил алкохола у односу  $4 : 1$ .

Један од експерименталних проблема на које се наилази при експериментима са пресама је неопходност финог рада. У чему је ствар? Цела преса је дугачка десетак центиметара и може да стане у шаку (сл. 2).



Слика 2. Попречни пресек модерне NBS пресе каква се користи и у Институту за физику.

Међутим, радна запремина пресе (тј. део где се смешта узорак) је веома мала. Почетна дебљина гаскета износи  $0.2 - 0.25\text{ mm}$ , а рупа која се у гаскету буши има пречник од свега  $200\text{ }\mu\text{m}$ .

Овако мали пречник рупе условљен је вредностима површина чела дијаманата који су у преси међусобно супротстављени, и чији пречник износи  $0.5 - 0.7\text{ mm}$  (Jayaraman, 1983). Одавде следи закључак да и узорци који се у пресама подвргавају притиску морају бити мали. И заиста, карактеристична величина узорака, као и зрна рубина, износи око  $50\text{ }\mu\text{m}$ . Пуњење пресе (што обухвата стављање узорка, рубина, хидростатика и почетно притискање узорка) је финна операција која се обавља под микроскопом пинцетама, или у боље опремљеним лабораторијама микро-манипулатором. У случају када се све брзо и добро одвија, процедура траје око 1 дан. О миру и концентрацији који су при томе потребни сведочи и податак да се мора водити рачуна и о пулсу онога ко пресу пуни, пошто је амплитуда померања руке услед откуцаја срца приближно једнака величини узорка и зрна рубина!

На овом месту могу се поставити два питања:

- морају ли дијаманти који се у преси користе да испуњавају неке специјалне услове, и
- како се притисак у преси мери?

Дијаманти су, на први поглед, потпуно провидни. Међутим, већ тридесетих година нашег века утврђено је да се они драстично разликују међусобно по оптичким и фото-електричним особинама (Robertson, Fox and Martin, 1934; Kaiser and Bond, 1959). На основу уочених међусобних разлика у ултраљубичастим и инфрацрвеним трансмисионим спектрима, тада је уведена подела дијаманата на два главна типа (I и II), од којих сваки има по две подврсте (означавају се са а и б). Физички основ ове класификације представља природа примеса и начин њихове расподеле у камену. На пример, у случају дијаманата типа Ia, атоми примесног азота распоређени су у малим групама у близини чворова кристалне решетке дијаманта (Kaiser and Bond, 1959).

Насупрот томе, у дијамантима типа Ib, атоми азота распоређени су по целију запремини камена. Најбољи, с тачке гледишта оптичких особина, су дијаманти типа IIb који су практично чисти (на пример, Adams and Sharma, 1977). Опредељење за неки од типова камена диктирано је, с једне стране, циљем експеримента, предвиђеним начином његовог остварења и очекиваним интензитетом сигнала, а с друге стране, финансијским могућностима. На пример, показано је да су у експериментима с Рамановим расејањем употребљиви само каменови типа Ia или IIa (Hirsch and Holzapfel, 1981).

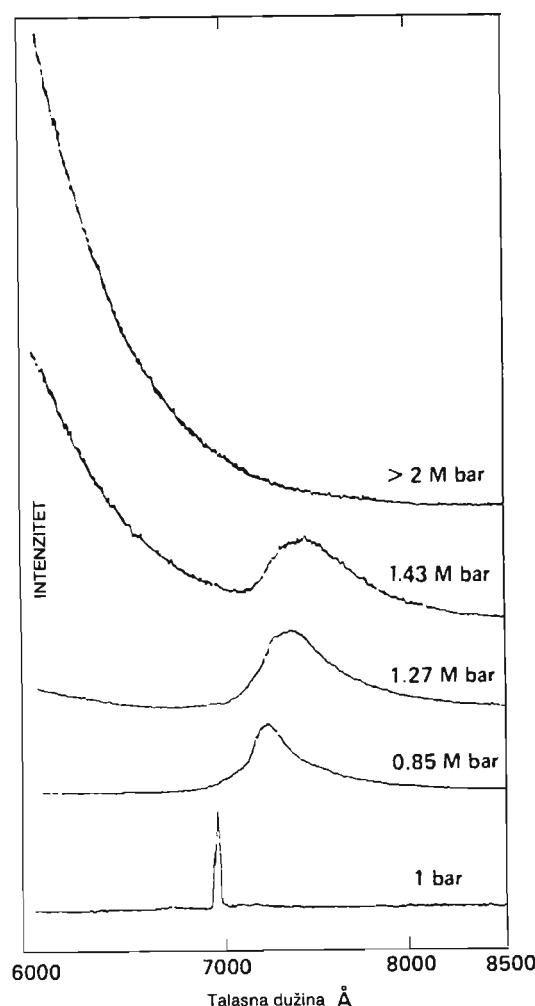
Кључно питање експерименталне физике високих притисака представља избор начина за мерење притиска. Могло би се помислiti да најједноставнију могућност за решење овог проблема пружа мерење силе која на узорак делује, а затим коришћење дефиниције (1). Ова идеја примењена је у неким старијим експериментима, али је у дијамантским пресама неупотребљива пошто би, услед мале површине узорака, резултати имали велике релативне грешке. У раним етапама експеримената са пресама, притисак је ипак мерен на овај начин.

Почетком седамдесетих година (Forman, Piermarini, Barnett et al, 1972) показано је да се спектралне линије рубина (R линије) ( $\text{Al}_2\text{O}_3 : \text{Cr}^{3+}$ ) линеарно померају са притиском. Шема енергетских нивоа између којих се дешавају прелази који доводе до појаве ових линија, као и облик спектра рубина на два различита притиска, приказани су на следећој слици.

Рубинска скала калибрисана је помоћу познатих тачака мржњења различитих течности и структурних фазних прелаза у неким чврстим телима (на пример  $\text{NaCl}$ ). Коefфицијент правца зависности таласне дужине RI линије од притиска износи  $0.365 \text{ nm/GPa}$  (Jayaraman, 1983). На већем притиску, преко  $50 \text{ GPa}$ , скала постаје нелинеарна, тако да коначна релација која повезује промену таласне дужине RI линије са притиском гласи (Mao et al, 1978):

$$P (\text{Mbar}) = 3.808 \{(\Delta\lambda/6942 + 1)^5 - 1\} \quad (2)$$

где  $\Delta\lambda$  означава промену таласне дужине RI линије изражену у нанометрима



Слика 3а. Спектри рубина.

( $1\text{nm} = 10 \text{\AA}$ ). Теоријско објашњење померања рубинових линија са притиском нађено је тек у току неколико последњих година (Ma et al, 1986, 1987, 1988; Jovanić, Zeković and Radenković, 1991), и заснива се на ширењу радијалног дела електронских таласних функција у молекулу рубина под дејством растућег притиска.

Поред испитивања материјала подвргнутог дејству притиска, у пресама је могуће истраживати и комбиновани утицај екстремних притисака и температуре на узорке. Највиша температура постигнута у преси износи око 8000 K (Williams, Jeanloz, Bass et al, 1987), док је најнижа вредност близу 4 K (Fabre and Thiery, 1984).

Electron Configuration	Cubic Field Terms	Including Trigonal Distortion	Including Spin-Orbit Interaction	Eigen-state	Energy (cm <sup>-1</sup> )
$t_2^2 e$	${}^4 T_1$		$\sim \zeta$	${}^4 A_2$ ${}^4 E$	25200 24400
$t_2^3$	${}^2 T_2$		$\sim -\zeta k$	$\bar{E}_b$ $\bar{E}_s$ $2 \bar{A}$	21360 21070 21000
$t_2^2 e$	${}^4 T_2$		$\sim \zeta$	${}^4 A_1$ ${}^4 E$	18450 18000
$t_2^3$	${}^2 T_1$		$\sim \zeta k$	$\bar{E}_s$ $2 \bar{A}$ $\bar{E}_b$	15190 15170 14960
$t_2^3$	${}^2 E$		$\sim \zeta k$	$2 \bar{A}$ $\bar{E}$	14430 14400
$t_2^3$	${}^4 A_2$		$\sim -\zeta^2 k$		0

Слика 3б. Шема нивоа.

Паралелно са применом рубинске скале у експериментима широм света, теку и истраживања усмерена на откривање алтернативних метода за мерење високих притисака. Неки интересантни резултати у том домену постигнути су и у нашој земљи. Показано је да време живота радијативног прелаза  ${}^2 E \Rightarrow {}^4 A_2$  у рубину линеарно расте са притиском, што се тумачи као последица опадања вероватноће за радијативни прелаз јона Cr<sup>3+</sup> у стање  ${}^2 E$  (Urošević, Panić, Jovanić et al, 1989; Jakšić, Urošević, Zeković et al, 1992). За притисак  $P \leq 12$  GPa (120 kbar) зависност времена живота  $\tau$  од притиска има облик

$$\tau(P) = \tau_0 + bP \quad (3)$$

где кофицијенти  $\tau$  и  $b$  имају вредности  $\tau_0 = (3.04 \pm 0.05)$  ms и  $b = (0.0312 \pm 0.0005)$  ms kbar<sup>-1</sup> (Urošević, Panić, Jovanić et al, 1989).

Јасно је да се из релације (3) на основу измерене вредности  $\tau(P)$  може израчунати притисак. Овај метод има вишеструке предности у односу на рубинску скалу (Jakšić, Urošević, Zeković et al, 1992). На пример, осетљивост метода је много већа: релативна промена вредности  $\tau(P)$  износи скоро 100%

при порасту притиска од 100 kbar, док је при мерењу рубинском скалом релативна промена таласне дужине много мања.

Овај поступак омогућава избегавање још једног проблема који се јавља при примени рубинске скале. На екстремно високом притиску (реда величине стотина килобара и преко мегабара), интензитет рубинових линија опада. Експериментално је показано (Ruoff, 1992a), да RI линија исчезава на притиску већем од 2.5 Mbar, што уједно представља и горњу границу применљивости рубинске скале. Старија мерења (нпр., Mao, Goettel and Bell, 1985) давала су нешто нижу вредност граничног притиска (1.9 Mbar). Систематска мерења времене живота рубинове линије у функцији притиска (Eggert, Goettel and Silveira, 1989; Jovanić, 1992a) показала су да почевши од неког граничног притиска дисперзија вредности  $\tau(P)$  драстично расте. То практично значи да је за притисак изнат поменуте границе (која износи око 550 kbar) овај метод мерења притиска непоуздан. Разрађен је и поступак за мерење притиска заснован на одређивању промене фазе foto – акустичног сигнала у рубину у функцији притиска (Jovanić, 1992b).

Поменимо да се, поред рубина, као "мерачи" притиска користе и други материјали. На пример, кристал Sm :  $Y_3Al_5O_{12}$  побуђен светлошћу ласера или одговарајуће спектралне лампе еmitује чак три линије. Експериментално је показано (Yusa, Yagi and Arashi, 1993) да је таласна дужина ових линија квадратна функција притиска за  $P \leq 50\text{GPa}$ , и одређени су њени кофицијенти. Такође је установљено да је спектар Sm :  $Y_3Al_5O_{12}$  скоро независан од температуре. Услед тога овај материјал је погодан за мерење притиска у експериментима у којима се узорак подвргава заједничком дејству високих притисака и температура.

Поред оптичких испитивања, о којима је до сада било речи, у дијамантским пресама могу се вршити и електрична мерења узорака под притиском. Принцип ових мерења је веома једноставан (нпр., Jayaraman, 1983, 1986; Williams and Jeanloz, 1991). Тешкоће у раду причинава минијатурност узорака (дакле мала механичка чврстоћа), њихова променљива геометрија при порасту притиска, као и чињеница да су преса и гаскет направљени од метала. При мерењима проводљивости гаскет се често пресвлачи неким изолаторским слојем (као што су MgO или  $Al_2O_3$ ). Притисак се у оваквим експериментима може мерити на два начина: стандардно, помоћу рубинске скале (на пример Savić and Urošević, 1987), или истовременим мерењем проводљивости узорка који се испituје и неког материјала за који је зависност проводљивости од притиска предходно већ одређена (нпр., Auban, Čelebonović, Tomić et al, 1991).

До сада смо говорили о пресама и методологији експеримената, а у наставку ће бити више речи о резултатима испитивања у пресама астрофизички интересантних материјала. Читаоца заинтересованог за експерименталне финесе упућујемо на неки од постојећих прегледних чланака (као што су Jayaraman, 1983, 1986; Williams and Jeanloz, 1991) и праћење текуће литературе.

Најраспрострањенији хемијски елемент у космосу је водоник. Познавање његовог фазног дијаграма важно је за теоријско истраживање унутрашње структуре и порекла звезда, великих планета и њихових сателита. Експерименти

извршени у области  $P < 1 \text{ Mbar}$ ,  $T < 800\text{K}$  (Hemmes, Driessen and Griessen, 1986) показују да се, при порасту притиска, молекуларни водоник понаша најпре као идеalan гас, затим као флуид и на крају прелази у чврсто стање.

Посебно интересантан проблем представља могућност да водоник, на довољно високом притиску, постане метал, и то чак суперпроводник. Теоријска истраживања ове могућности започела су пре скоро 60 година (Wigner and Huntington, 1935). Тада је показано да би, на довољно високом притиску, дошло до кидања хемијских веза у молекуларном водонику и ослобађања електрона везе, а цео систем би прешао у једноатомни метал налик на алкалне метале.

По тадашњим проценама, за метализацију водоника потребна је релативна промена густине за фактор 10 у односу на вредност под стандардним условима, што одговара притиску од око 2 милиона атмосфера. Данас се сматра (на пример, Ashcroft 1989; Barbee et al, 1989; Čelebonović, 1989d и референце које се тамо наводе) да се метализација водоника дешава на притиску од  $3 \text{ Mbar}$  (300 GPa) а да критични притисак и температура за прелаз у суперпроводно стање износе  $P = 400\text{GPa}$  и  $T = (230 \pm 85)\text{K}$  (Barbee et al, 1989).

Оба ова резултата нису још увек експериментално проверена. Пре неколико година (Mao and Hemley, 1989) у литератури су се појавиле тврдње да је у дијамантској преси остварен фазни прелаз водоника у метал. У експерименту су вршene две врсте мерења: праћена је зависност коефицијента рефлексије водоника у преси од притиска (што се теоријски може повезати са електронском структуром система у тзв. апроксимацији независних електрона), а такође су снимани Раманови спектри водоника у функцији притиска. Анализе Рамановог спектра материјала под притиском пружају податке о променама електронске структуре и релативног кретања протона у паровима молекула у узорку.

Притисак је мерен у рубинској скали и урађено је седам серија мерења водоника до притиска већег од 250 GPa. Поређења ради извршен је и исти број серија мерења у празној преси у циљу праћења промена оптичких особина дијаманта под притиском. Анализа прикупљених података показала је да електронске ексцитације у видљивом делу спектра почињу да се јављају на притиску од око 200 GPa, што је протумачено као последица метализације водоника изазване преклапањем дозвољених енергетских зона. Касније је показано (Ruffo, Greene, Ghaderi et al, 1992) да у овом експерименту није вођено рачуна о неким хемијским реакцијама које се у преси одигравају, па су услед тога прикупљени подаци некоректно протумачени, и није остварен прелаз водоника у метал. Поред очигледне важности за планетологију (нпр., у центру Урана влада притисак од 350 GPa, па је евентуално присутни водоник у металном стању), могућност преласка водоника у суперпроводно стање имала би и важне практичне импликације – био би то суперпроводник са највишом критичном температуром.

Најпознатије једињење водоника је свакако вода ( $\text{H}_2\text{O}$ ). У чemu је значај испитивања понашања воде под високим притиском за астрофизику? Постојање леда (чисте воде, или са додатком разних примеса) утврђено је на површинама низа сателита, као и на неким планетама (Земља, Марс). Тумачење особина ових слојева није могуће без познавања њихове једначине стања и кристалне

структуре (неке фазе леда су кристалне а неке аморфне), а она зависи од притиска под којим је лед настало. Молекули воде (услед ниске температуре били су у форми леда) учествовали су у стварању Сунчевог система. У његовим унутрашњим деловима (до орбите Земље) присуство леда и / или воде није могло имати важну улогу у процесу стварања планета, услед високе температуре изазване близином Сунца. Међутим, од Марса на даље, постојање воде и леда мора се узети у обзир при стварању космогонијских модела и истраживањима унутрашње структуре планета, сателита и астероида.

Експериментална испитивања понашања воде под високим притиском започела су почетком нашег века (Tammann, 1900), а највећи притисак коме је до сада подвргнута износи 1.28 Mbar (128 GPa) (Hemley, Jephcoat, Mao et al, 1987). У том експерименту је измерено смањење моларне запремине узорка са порастом притиска, и тиме је експериментално одређена једначина стања леда (на  $T = 300\text{K}$ ). Нумеричком обрадом података прикупљених у овом експерименту може се, на пример, показати да за притисак  $p \leq 16.2\text{GPa}$  ( $162\text{kbar}$ ), једначина стања воде има облик

$$V_m = 0.00001p^5 - 0.0024p^4 + 0.0439p^3 - 0.3697p^2 + 1.2221p + 9.5329 \quad (4)$$

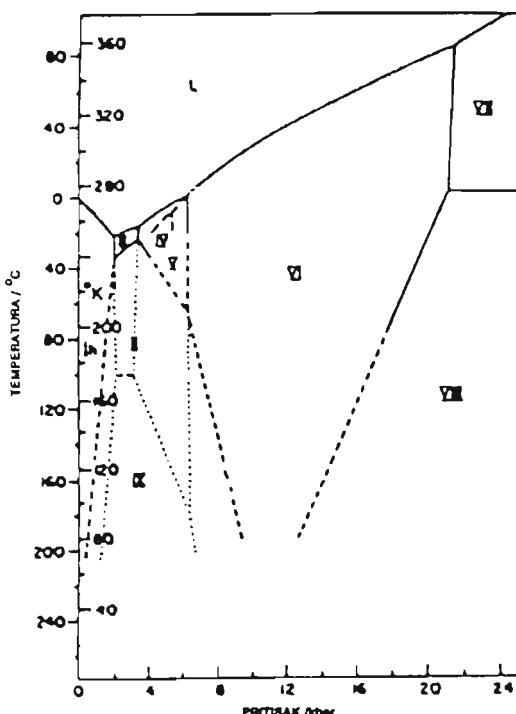
где  $V_m$  означава моларну запремину воде.

Полазећи од једначине стања, нумерички одређене из целог скупа података прикупљеног у овом експерименту, показано је да је стишљивост леда на екстремно високом притиску (преко  $100\text{ GPa}$ ) мања него што би се очекивало на основу експерименталних података из области  $30 < P(\text{GPa}) < 50$ . Добијене вредности су веће од оних које следе из неких теоријских модела (Hemley, Jephcoat, Mao et al, 1987), што сведочи о тренутно недовољном познавању међу-молекулског потенцијала интеракције у леду (нпр, Whalley, 1985).

Неадекватност нашег познавања међу - молекулског потенцијала није тако зачујујућа, с обзиром на компликовану структуру фазног дијаграма леда. Један део овог дијаграма приказан је на следећој слици: пошто се данас зна за постојање чак 12 фаза леда (Bishigitov and Sirota, 1986) потпун фазни дијаграм би био исувише компликован.

Овако сложена структура фазног дијаграма условљена је конфигурационом ентропијом неких фаза (Whalley, 1985). Она се јавља пошто је сваки кисеоников атом везан са своја четири суседа водоничним везама које су асиметричне, тако да атом водоника може произвољно постављен у односу на центар. Сваки молекул воде може имати неку од 6 могућих оријентација у односу на своја 4 најближа суседа. Пошто, с друге стране, сваки молекул воде има највише два атома водоника у близини, оријентације суседних молекула су јако корелисане.

Може се показати (Whalley, 1985) да услед тога постоји конфигурациона ентропија која има утицаја на структуру фазног дијаграма и области стабилности појединих фаза у  $(P, T)$  равни. На пример, лед XII (Bishigitov and Sirota, 1986) стабилан је у следећим интервалима:  $90 < T(\text{K}) < 250$  и  $1200 < P(\text{MPa}) < 2150$ . Теоријски је утврђено да лед XI прелази у метал на  $P = 1.76\text{ TPa}$  (Hama, Shiomi and Suito, 1990). Поменимо да је било и неких



Слика 4. Фазни дијаграм леда.

експерименталних индикација о метализацији воде под притиском (Polian, Besson and Grimsditch, 1985), али оне у каснијим радовима нису потврђене.

Интересантну област примене дијамантских преса представља испитивање понашања под високим притиском материјала за које се (на основу неких показатеља) сматра да постоје у унутрашњости Земље. То су, углавном, разноврсни силикати, карбонати и гвожђе. Пошто је о неким резултатима ових експеримената било недавно речи у домаћој литератури (Čelebonović, 1990; 1993b) упућујемо читаоца на те радове. Мерења електричне проводљивости геофизички интересантних минерала омогућавају индиректно одређивање топлотног флуksа у унутрашњости Земље (Laštovičkova, 1991).

Пре неколико година (1985.) почeo је експоненцијалном брзином да се развија нов домен на граници астрофизике и физике чврстог стања - истраживање кластера угљеникових атома. Понашање ових материјала (под високим притиском, али и без њега) важно је за обе области, па ћemo у наставку приказати неке кључне резултате ових испитивања. За детаљан увод у проблематику угљеникових кластера и одговарајућу библиографију види (Čelebonović, 1992b).

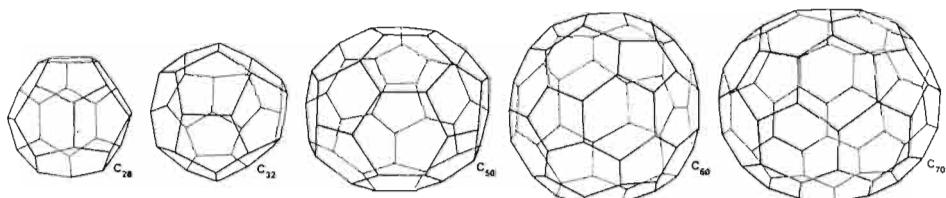
Појмом кластер (cluster на енглеском значи јато) означава се у физици скуп

атома исувише велики да би носио назив молекул, а истовремено недовољно велики да би се могао назвати чврстим телом. У случају угљеника, примећено је средином четрдесетих година да могу да постоје групе од 15 атома. Радови у последњих неколико година показали су да постоје кластери од 60 угљеникових атома; највећи синтетисани кластери садрже чак 266 атома угљеника.

Развој истраживања кластера угљеникових атома био је мотивисан покушајима решавања једног "дуготрајног" астрофизичког проблема: интерпретацијом дифузних међузvezdanih апсорбиционих линија. Дефинитивно решење овог проблема, и евентуална релевантност угљеникових кластера за њега још увек су предмет истраживања. Међутим, установљено је да су ови материјали веома интересантни за физику чврстог стања: нека њихова јединења су суперпроводна, са критичним температурама реда 30 - 40 K.

Прва посматрања која су показала да промене боје (и то у правцу црвеније) звезда на појединим деловима неба потичу од апсорбиције и расејања светlostи звезда на малим међузvezdanim зрнцима датирају из средине тридесетих година. Три деценије касније, крајем шездесетих година, откривени су први молекули у међузvezданом простору (на пример,  $\text{NH}_3$  и  $\text{H}_2\text{O}$ ). Дуго времена је владало мишљење да се присуство ових (и низа касније откривених молекула) може објаснити низовима би-молекуларних јон-молекулских реакција, и реакцијама на површинама међузvezdаних зрна. Међутим, ово тумачење је доведено у питање када су 1982. године откривени у међузvezданом простору молекули опште формуле  $\text{HC}_n\text{N}$  са  $3 \leq n \leq 11$ ; такође је показано да око неких звезда касних спектралних типова постоје мали кластери угљеника ( $\text{C}_3$ ).

Данас се сматра да се зрнца угљеника у међузvezданом простору и атмосферама звезда сastoјe из аморфног графита, а да угљеникови ланци настају у реакцијама између угљеникових кластера (који са своје стране настају испарањем графита са међузvezdаних зрна) и једноставних молекула који су присутни у међузvezданом простору. Овај теоријски закључак (за референце види Čelebonović, 1992b) потврђен је и експериментално, при чему је показано да су најстабилнији (и релативно најзаступљенији) кластери са 60 атома угљеника –  $\text{C}_{60}$ . Предложени облик молекула  $\text{C}_{60}$  – познат у геометрији као икосаедар – приказан је на следећој слици.



Слика 5. Молекул  $\text{C}_{60}$ .

Види се да овај објекат има 60 вертекса и 32 странице, од којих су 12 петоугаоне а 20 шестоугаоне, и да личи на добро познат предмет из живота - фудбал. Име фулерен дато је овом материјалу зато што његов молекул по облику подсећа на куполе које је средином нашег века зидао амерички архитекта Р. Бакминстер-фулер ( R.Buckminster-fuller ).

Идеја о томе да би дифузне међувезане апсорpcione линије могле да буду објашњене фулереном дата је на основу поређења оптичких особина фулерена (чистог  $C_{60}$  и мешавине  $C_{60} + C_{70}$ ) са међувезданим апсорpcionим спектрима, и изузетне стабилности молекула  $C_{60}$ . И ако су запажене извесне сличности, проблем се још увек не може сматрати за решен.

Чист  $C_{60}$  је изолатор. Међутим, његова једињења (тзв. фулериди) са металима су суперпроводници са високим критичним температурама. Тако, на пример,  $Rb_3C_{60}$  има  $T_c = 29$  К; у случају  $Cs_3C_{60}$   $T_c = 40$  К. Интересантно је да (барем у границама расположивог информативног флукса) механизам проводљивости у овим материјалима још није откривен. Сматра се да је суперпроводност фулерида последица велике густине стања на Фермијевом нивоу, и интеракције тих електрона са фононима високих фреквенција (Palstra, Zhou, Iwasa et al, 1995). За неке фулериде измерена је ширина енергетског процепа између нормалне и суперпроводне фазе. На пример, за  $Rb_3C_{60}$  се добија да је  $2\beta\Delta = 5.3$  ( $\beta$  означава инверзну температуру). Ова вредност је упоредљива са резултатима за високо- температурне суперпроводне керамике на бази бакар оксида, и скоро је за фактор 2 већа од предвиђања BCS теорије, по којој је  $2\beta\Delta = 3.53$ . Одавде следи закључак да су фулериди први примери јако корелисаних органских проводника у три димензије, што би могло олакшати трагање за физичким објашњењем њихове проводљивости.

Експерименти у којима је фулерен подвргнут променљивом притиску и температури дају интересантне резултате. Откривена су два фазна прелаза на притиску од око 0.3 GPa и 15 - 20 GPa. Ови резултати могу се репродуковати у оквиру семикласичне теорије о понашању материјала под високим притиском П. Савића и Р. Кашанина (Čelebonović, 1992a), о којој ће бити више речи у следећем поглављу. На температури  $T \cong 260$  K долази до фазног прелаза првог реда у фулерену, док се на  $T \cong 90$  K дешава континуални фазни прелаз. Измерена је и стишљивост фулерена, и добијено је да је он најмекши познати материјал који се састоји само из угљеника, што се уклапа у теоријски модел по коме су молекули фулерена у чврстом материјалу међусобно везани ван дер Валсовим и Кулоновим силама.

### 3. Теоријска истраживања

Сви физички системи, од хадрона до јата галаксија, сastoје се од интегријућих честица. Разноликост система који у природи постоје условљена је комбинацијом малог броја фактора: особинама међучестичног потенцијала и средњом енергијом по честици. Основни теоријски метод за истраживање многочестичних система је тзв. "many - body" поступак. Суштина ове технике

је у томе што се, полазећи од предпостављеног (или на неки начин одређеног) облика међу - честичног потенцијала, рачунају Гринове функције. На основу њих се даље може одредити једначина стања, енергетски спектар и све остale особине датог система (на пример, Negele and Orland, 1988). Поређењем резултата оваквих израчунавања са експериментима у којима се систем подврѓава дејству спољашњег притиска и екстремних температура, постаје могуће тестирање теоријских идеја на којима су израчунавања заснована.

Теоријска физика и астрофизика густе материје су тема бројних монографија, истраживачких и прегледних радова (на пример, Schwarzschild, 1958; Leung, 1984; Eliezer, Ghatak and Hora, 1986; Negele and Orland, 1988; Schaeffer, 1992; Ter-Kazarian, 1992). Широта области, број проблема и огроман распон вредности параметара стања у коме могу постојати физички системи, доводи до тога да је практично немогуће написати свеобухватан прегледни рад или монографију о овој области. Услед тога, у овом раду ће бити речи само о двема групама проблема:

- одређивање једначине стања и тачака фазних прелаза у густој материји, и
- семикласична теорија понашања материјала под високим притиском Павла Савића и Радивоја Кашанина.

### 3.1 Једначине стања и фазни прелази

Стање термомеханичког система одређено је познавањем вредности његове запремине  $V$ , температуре  $T$  и притиска  $p$ . Релација која повезује ове три променљиве, и има општи облик  $f(p, V, T) = 0$  носи назив једначина стања.

Истраживања извршена у првој половини прошлог века показала су да једначина стања идеалног гаса има облик

$$pV = RT \quad (5)$$

где  $R$  означава гасну константу.

Недостатак ове једначине је у томе што је примениљива само на разређене флуиде у којима су међучестичне интеракције занемарљиве. Основни проблем везан за избор једначине стања било ког физичког система састоји се у одређивању начина за урачунавање међучестичних интеракција.

Један од могућих поступака којим се узимају у обзир ефекти изазвани постојањем међучестичних интеракција је тзв. виријелни развој једначине стања. Користи се у густим флуидима, а применљив је у произвољном систему за који је познат Хамилтонијан.

У виријелном развоју се једначина стања представља као развој по степенима густине, при чему коефицијенти растућег реда у развоју потичу од интеракција одговарајућег реда у систему. Појмом ред интеракције овде се означава број честица које у њој учествују. Детаљи извођења овог облика једначине стања могу се наћи у монографијама из статистичке механике (као што је Reichl, 1988) а у наставку наводимо само неколико основних једначина.

Симбол  $v_{ij}$  означава међучестични потенцијал интеракције. Показало се корисним да се у израчунавањима уместо  $v_{ij}$  уведе функција

$$f_{ij} = \exp(-\beta v_{ij}) - 1 \quad (6)$$

пошто има погодно асимптотско понашање.

Виријелни развој једначине стања гласи

$$pV / [ < N > k_B T ] = \sum_{\ell=1}^{\infty} B_{\ell}(T) (< N > / V)^{\ell-1} \quad (7)$$

где  $B_{\ell}$  означава виријелни кофицијент  $\ell$ -тог реда, а сви остали симболи имају уобичајено значење.

Може се показати (нпр. Reichl, 1988) да је  $B_1 = 1$ ; кофицијенти вишег реда одређени су ефектима до којих доводе интеракције честица груписаних у све већа јата. На пример, кофицијент  $B_2(T)$  даје корекцију једначине стања идеалног гаса изазвану двочестичним интеракцијама, и задат је изразом

$$B_2(T) = -1 / (2V) \int \int dr_1 dr_2 f(r_{12}) = -(1/2) \int dr_{12} (e^{-\beta v(r_{12})} - 1) \quad (8)$$

где су  $dr_1, dr_2$  елементи запремине и  $r_{12} = r_2 - r_1$  означава међусобно растојање интерагујућих честица. У случају сферно симетричне интеракције (а такве су најчешће) је  $dr_{12} = 4 \pi r_{12}^2 dr_{12}$ , па коначан израз за други виријелни кофицијент гласи

$$B_2(T) = -2\pi \int_0^{\infty} (e^{-\beta v(r)} - 1) r^2 dr \quad (9)$$

Виријелни кофицијенти трећег и вишег реда израчунавају се на сложенији начин.

Израз (9) постаје употребљив тек избором међучестичног потенцијала  $v(r)$ . Облик ове функције може се одредити тзв. поступком инверзије термофизичких особина система (нпр. Trusler, 1988). Овај поступак омогућава да се на основу измерених вредности функција стања система при различитим условима израчунају параметри међумолекулског потенцијала. Квалитативно говорећи, примена виријелног развоја једначине стања тече на следећи начин: одабере се, на основу неких математичких или физичких разматрања, облик функције  $v(r)$ , и на основу њега одреде кофицијенти  $B_2(T)$  и евентуално  $B_3(T)$ . Добијени резултати уврсте се у развој (7), а затим се тако одређена једначина стања упоређује са експерименталним подацима за неки реални физички систем (флуид). Крајњи резултат овог поступка су вредности параметара одабраног облика потенцијала за дати физички систем. Уз познавање једначине стања, и вредности параметара потенцијала, коришћењем познатих термодинамичких релација могу се одредити термодинамички потенцијали система.

Један од познатих моделних потенцијала је тзв. потенцијал "квадратне јаме", који има следећи аналитички облик:

$$v(r) = \begin{cases} \infty & 0 < r < \sigma \\ -\varepsilon & \sigma < r < Rr \\ 0 & Rr < r \end{cases} \quad (R > 0) \quad (10)$$

Одавде се, помоћу једначине (9) добија следећи израз за  $B_2(T)$  (Reichl, 1988):

$$B_2(T) = (2\pi\sigma^2/3) [1 - (R^3 - 1)(e^{\beta\varepsilon} - 1)] \quad (11)$$

заменом овог резултата у израз (7) следи коначан облик виријелног развоја једначине стања за потенцијал "квадратне јаме". Применом овако добијене једначине стања на експерименталне податке за метан ( $\text{CH}_4$ ) добија се да је, у интервалу температура  $273 < T (\text{K}) < 623$ ;  $\varepsilon/k_B = 142.5 \text{ K}$ ;  $\sigma = 3.355 \text{ \AA}$ ;  $R = 1.60$  (Reichl, 1988). Навели смо податке за метан као пример зато што су они планетолошки интересантни, пошто метан улази у састав атмосфера неких планета (на пример, има га на Јупитеру, Сатурну и Урану).

Досадашње разматрање односи се претежно на флуиде. У чврстим телима, поступак за успостављање једначине стања полази од анализе различитих до-приноса укупној енергији и притиску. Уз предпоставку да је електрон-фононска интеракција занемарљива, енергија и притисак могу се изразити на следећи начин (нпр, Eliezer, Ghatak and Hora, 1986):

$$E = E_c + E_{Ta} + E_{Te} \quad (12)$$

$$P = P_c + P_{Ta} + P_{Te} \quad (13)$$

где су  $E_c$  и  $P_c$  енергија и притисак чврстог тела за  $T = 0 \text{ K}$ ;  $E_{Ta}$  и  $P_{Ta}$  означавају доприносе енергији и притиску који потичу од топлотних вибрација атома око њивих равнотежних положаја, док су са  $E_{Te}$  и  $P_{Te}$  означени одговарајући електронски доприноси.

Компоненте  $E_c$  и  $P_c$  могу се представити помоћу неког од теоријских модела материје на  $T = 0 \text{ K}$  (као што је Томас-Фермијев модел), док су изрази за  $E_{Te}$  и  $P_{Te}$  познати из теорије Ферми-гаса (нпр, Eliezer, Ghatak and Hora, 1986; Reichl, 1988).

Најједноставнији облик једначине стања представља тзв. Грунаизен-ова једначина која има облик

$$P_{Ta} = (\gamma/V) E_{Ta} \quad (14)$$

Симбол  $\gamma$  означава Грунаизен-ов параметар, дефинисан релацијом

$$\gamma = -\partial \ln \Theta_D / \partial \ln V \quad (15)$$

где је са  $\Theta_D$  означена Дебајева температура. Може се показати да је Грунаизен-ов параметар повезан са карактеристикама потенцијала интеракције у датом систему.

Израчунавање  $E_{Ta}$  захтева претходно одређивање спектралне расподеле фреквенција атомских вибрација. Најједноставнији модели ове расподеле су Ајнштајнов (атоми у чврстом телу су међусобно независни и сви вибрирају истом фреквенцом) и Дебајев модел (атоми су међусобно упарени, вибрирају колективно и постоји расподела по фреквенцијама). Дебајев модел је физички много реалнији и боље се слаже са експериментима (нпр. Eliezer, Ghatak and Hora, 1986). Израз за  $E_{Ta}$  у овом моделу гласи:

$$E_{Ta} = 9 RT \left( T / \Theta_D \right)^3 \int_0^{T/\Theta_D} \xi^3 / (\exp \xi - 1) d\xi \quad (16)$$

што представља енергију чврстог тела (по молу) у Дебајевом моделу. Симбол  $\xi$  у горњем изразу означава  $\xi = \beta h\nu$  ( $\beta$  означава инверзну температуру,  $\nu$  фреквенцу вибрација а  $h$  је Планкова константа). Заменом једначине (16) у (14) може се добити експлицитан облик једначине стања чврстог тела.

Шта су мотиви за теоријско заснивање једначина стања физичких система? Навешћемо само неке:

- на основу познате једначине стања, коришћењем стандардних термодинамичких релација, могу се израчунавати различите функције стања система; поређење резултата таквих израчунавања са експериментима често пружа могућност за одређивање неких параметара система;
- у астрофизици, познавање једначине стања је неопходан предуслов за све покушаје моделирања унутрашње структуре планета и звезда. У овом случају, додатну компликацију уноси и непознавање хемијског састава. Ова тешкоћа се обично превазилази комбиновањем података о хемијском саставу површине и неких додатних поставки о структури и еволуцији датог објекта.
- познавање једначине стања корисно је при истраживању појава фазних прелаза. О чему се ради? Полазећи од Хамилтонијана система, могу се (у принципу) одредити партициона функција и слободна енергија, а на основу ње и све остале термодинамичке функције. Тачке у простору стања у којима термодинамичке функције постају сингуларне називају се тачкама фазних прелаза. Познавање једначине стања корисно је у истраживањима фазних прелаза зато што омогућава праћење промене стања система и при прилазу тачки у којој се прелаз дешава. Теорија фазних прелаза је веома разграната област физике, и у њу се на овом месту не можемо упуштати; евентуално заинтересованог читаоца упућујемо на бројне монографије, прегледне и истраживачке радове посвећене фазним прелазима у разноврсним физичким системима (примери монографија су Stanley, 1971; LeBellac, 1988; Negele and Orland, 1988; Sewell, 1989; Linde, 1990).

Постоји један интересантан детаљ, и уједно озбиљан нерешен теоријски проблем, везан за фазне прелазе у систему подвргнутом високом спољашњем притиску. Не постоји (по сазнањима аутора) у оквирима данашње статистичке механике разрађен теоријски поступак којим се за произвољан физички систем може предвидети притисак на коме ће у њему доћи до фазног прелаза. У жаргону статистичке механике, тешкоћу у развијању таквог поступка представља

избор погодног "параметра реда". Важан допринос решавању овог проблема даје семи - класична теорија понашања материјала под високим притиском Павла Савића и Радивоја Кашанина (такозвана СК теорија), о којој ће бити више речи у наставку текста.

### *3.2 Теорија П. Савића и Р. Кашанина*

Павле Савић и Радивоје Кашанин развили су своју теорију о понашању материјала под високим притиском у првој половини шездесетих година (Savić and Kašanin, 1962/65). Теорија је коришћена и разрађивана у низу публикација различитих аутора (нпр. Čelebonović, 1992c; Savić and Čelebonović, 1994 и референце које се тамо наводе).

Настала је као директна последица једног Савићевог рада (Savić, 1961, скраћено означен са S 61) у коме је покушао да објасни порекло ротације небеских тела. Закључак тог рада био је да је ротација блиско повезана са унутрашњом структуром небеских тела, и да је за њено коректно тумачење неопходна теорија о понашању материјала под високим притиском. Нећемо се, на овом месту, упуштати у све математичко-физичке детаље на којима се заснива теорија СК. Уместо тога, приказаћемо квалитативно основне идеје теорије и дати примере њене применљивости у астрофизици и физици чврстог стања.

Разматрана у раду S 61 односе се на ниско-температурни облак неодређеног облика састављен од произвольног броја хемијских елемената. Два физичка процеса битно утичу на живот оваквог облака: међусобна гравитациона интеракција честица од којих се облак састоји и губитак енергије услед топлотног зрачења. Заједнички резултат ових процеса је опадање температуре почетног облака и, истовремено, пораст његове средње густине и унутрашњег притиска. Пораст притиска доводи до ексцитације и јонизације атома и молекула у унутрашњости облака (тзв. јонизација притиском). У терминологији квантне механике, то значи да пораст притиска доводи до ширења радијалног дела електронских таласних функција у атомима и молекулима елемената од којих се састоји облак. Први квантно-механички приступ овом проблему датира од пре неколико година (Ma, Wang, Chen et al., 1988), чак три деценије пошто је идеја о могућности јонизације притиском искоришћена у теорији СК. Могућност јонизације атома под дејством високог притиска први пут је поменуо Енрико Ферми тридесетих година нашег века, али само као узгредан резултат добијен при решавању Шредингерове једначине за неке једноставне моделе атома.

Предпоставимо, једноставности ради, да почетни облак садржи атоме само једног хемијског елемента. Под дејством растућег притиска он ће прећи у стање дво-компонентне плазме, која се састоји из електронског гаса и атома и/или молекула јонизованих деловањем притиска. Електронски гас чине електрони избачени из атома брзинама које су случајно распоређене по правцу, смеру и интензитету.

За такав електронски гас може се показати (de Groot and Suttorp, 1972) да

има магнетно поље које није идентички једнако нули. Под дејством високог притиска магнетни моменти атома и молекула у почетном облаку оријентишу се паралелно, и резултујући момент силе који делује на њих (пошто се налазе у магнетном пољу које је, с њихове тачке гледишта, спољашње поље) доводи до отпочињања ротације целог система. Може се, на први поглед, учинити да је описано објашњење порекла ротације веома квалитативно. Његова детаљна разрада (Savić and Kašanin 1962/65, III i IV; Savić, 1981) даје бројне вредности јачина магнетних поља и могућих интервала брзина угаоне ротације Сунца и планета које се добро слажу са посматрачким подацима. На пример, израчунавања по СК теорији дају за јачину магнетног поља Јупитера вредност између 10 и 14 Gausa, док мерена вредност износи 14 Gausa (Savić, 1981). Посматрана вредност брзине ротације Сунца у екваторијалној области износи  $2.9 \cdot 10^{-6} \text{ rads}^{-1}$ ; физички могући интервал по теорији Савића и Кашанина је ( $1.2 \leq \omega \leq 44.7$ )  $\cdot 10^{-6} \text{ rads}^{-1}$ .

Поред израчунавања јачина магнетних поља и дозвољених интервала брзине ротације, СК теорија омогућава израчунавања модела унутрашње структуре чланова Сунчевог система. Полазећи од само два посматрачка податка (масе и радијуса објекта) могу се одредити број и дебљина слојева који постоје у унутрашњости датог објекта, расподела притиска, густине и температуре са дубином, као и средња атомска маса хемијске смеше од које се тело састоји. Израчунато је, на пример, у оквиру ове теорије, да дубина тзв. Мохо - дисkontинуитета у унутрашњости Земље износи 39 km; експериментална вредност је 33 km, што се може сматрати за добро слагање. Исто тако, показано је да је магнетни момент Месеца нула, што је касније потврђено и директним мерењима са различитих космичких сонди. Недавно је помоћу СК теорије израчунато да температура у центру Земље износи 7000 K, што се одлично слаже са подацима из експеримената у дијамантским пресама. У следећој табели приказан је модел унутрашње структуре Земље по СК теорији. Сви употребљени симболи имају уобичајена значења.

ТАБЕЛА I: Унутрашња структура Земље по теорији СК

дубина (km)	0 - 39	39 - 2900	2900 - 4980	4980 - 6371
$\rho_{\max}$ ( $g cm^{-3}$ )	3.0	6.0	12.0	19.74
$P_{\max}$ (Mbar)	0.25	1.29	2.89	3.7
T(K)	1300	2700	4100	7000

Хемијски састав небеских тела представља последицу процеса у којима су ови објекти настали. Пошто је у космогонији директан експеримент немогућ (нико није скупљао податке у доба стварања планетног система), један од начина на који се могу доносити закључци о стварању Сунчевог система је анализа хемијског састава његових чланова. У следећој табели наведене су вредности средње атомске масе (означена са  $\langle A \rangle$ ) смеша од којих се састоје појединачна тела Сунчевог система. Симболи  $J_i$  ( $i = 1,.., 4$ ) и  $U_k$  ( $k = 1,.., 5$ ) означавају сателите Јупитера и Урана. Података за Сатурн и Плутон за сада нема (нису израчунати у оквиру теорије СК).

ТАБЕЛА II: Хемијски састав неких тела Сунчевог система

ТЕЛО	$\langle A \rangle$	САТЕЛИТ	$\langle A \rangle$
Сунце	1.4	Месец	71
Меркур	113	J1	70
Венера	28.12	J2	71
Земља	26.56	J3	18
Марс	69	J4	19
Церес	96	У1	38
Јупитер	1.55	У2	43
Сатурн	—	У3	44
Уран	6.5	У4	32
Нептун	7.26	У5	32
Плутон	—	Тритон	67

Анализом ове табеле могу се извести интересантни космогонијски закључци. Скицираћемо их, а за детаљније разматрање упућујемо читаоца на постојећу литературу (Čelebonović, 1986, 1988).

Лако се види да је Сунчев систем хемијски нехомоген; уочава се позната подела на планете Земљиног и Јупитеровог типа. Мала планета Церес, чија се данашња орбита налази између путања Марса и Јупитера, је по свом хемијском саставу блиска Меркуру. На бази вредности  $\langle A \rangle$  за Церес, наведене у табели II израчуната је маса астероида Хигија (10 Hygiea) и добијено одлично слагање са резултатима небеске механике. Сличан контраст постоји у систему Нептун – Тритон: њихове средње атомске масе разликују се скоро за цео ред величине. Ова разлика може се протумачити као последица чињенице да Тритон и Нептун нису настали у истој области протопланетарног облака у исто време, већ да је Тритон тзв. "захваћено тело".

Теорија Савића и Кашанина нашла је примене и у лабораторијској физици високих притисака. Поступком који је детаљно развијен у оквирима ове теорије, могуће је одредити тачке фазних прелаза и облик једначине стања материјала подвргнутих високом притиску. Алгоритам предложен у оквирима теорије много је простији од приступа том проблему у стандардној статистичкој механици. Средња међучестична удаљеност дефинише се у овој теорији тако да одговара положају стабилне равнотеже "пуног" међучестичног потенцијала; полазна предпоставка у СК теорији је да атоми и /или молекули у узорку под притиском интерагују само чистим Кулоновим потенцијалом. У материјалу подвргнутом растућем притиску дешава се, по овој теорији, низ фазних прелаза. Пронађено је и одговарајуће селекционо правило за раздвајање физички и математички могућих прелаза. Густине двеју узастопних фаза разликују се за фактор 2. Овај однос је последица једног емпиријског правила, уведеног најпре у S 61 из астрофизичких разлога (описује средње густине планета) чије је важење касније проширено и на лабораторијске експерименте под високим притиском (Savić and Kašanin, 1962/65; Čelebonović, 1989d, 1992c).

Полазећи од ових (и још три) постулата, који су детаљно објашњени у оригиналним публикацијама Савића и Кашанина, као и у каснијој литер-

атури постаје могуће теоријски предвидети вредности притиска на којима ће се, у задатом материјалу под притиском, десити фазни прелаз. Тако, на пример, израчунато је да се метализација водоника може очекивати на  $P \cong 300 \text{ GPa}$  ( $3 \text{ Mbar}$ ) а одговарајући резултат за хелијум износи чак  $1060 \text{ GPa}$  ( $106 \text{ Mbar}$ ) (Čelebonović, 1989d). Ови резултати су још увек ван домена статичких експеримената, тако да нису експериментално проверени, али су у задовољавајућој сагласности са вредностима добијеним у другим независним израчунавањима. Недавно је обављено систематско поређење резултата добијених применом СК теорије са експерименталним подацима за 19 случајно одабраних материјала (Čelebonović, 1992c). Релативна одступања теоријских од експерименталних резултата износе од 0 до приближно 30%; анализирани су неки од узрока ових одступања, и указано је на могућности њиховог смањења. На пример, било би веома корисно променити потенцијал интеракције у СК теорији. Може се очекивати да би се употребом скранираног уместо "чистог" Кулоновог потенцијала добила мања одступања израчунатих од мерених вредности притисака на којима се дешавају фазни прелази. Један од анализираних материјала био је CdS. Измерена вредност притиска на ком се у овом материјалу дешава фазни прелаз износи  $27 \text{ kbar}$  ( $2.7 \text{ GPa}$ ), док је теоријски резултат  $26.3 \text{ kbar}$  ( $2.63 \text{ GPa}$ ).

### Уместо закључка

Физика и астрофизика материје под високим притиском су области науке у бурном развоју. У нашој земљи њима се бави сразмерно мали број истраживача, па је, услед тога и број публикација у домаћој литератури мали. Циљ овог рада било је пружање увида у правце активности у физици и астрофизици густе материје којима се баве наши истраживачи. Из рада су изостављени интересантни аспекти физике и астрофизике густе материје везани за физику честица и теорију релативости. На пример, није било говора о фазним прелазима у супергустој врелој материји каква је постојала у раном Свемиру (електро-слаби прелаз, прелаз квark – хадрон). Није било речи о проблемима једначине стања неутронског гаса, који су интересантни због истраживања неутронских звезда и белих патуљака, као ни о експериментима са акцелераторима тешких јона у којима се може одређивати једначина стања супер - густе материје.

Често се помиња да је за успешно бављење науком потребан склоп добрих услова какви се у нашој земљи из различитих разлога тешко могу остварити. Физика и астрофизика густе материје су управо примери за супротно. Основни предуслови за рад постоје, а такође и мноштво отворених експерименталних и теоријских проблема. На пример, постигнути су важни резултати у развоју алтернативних метода мерења притиска. Ради се на конструкцији акцелератора тешких јона, што би омогућило отварање низа области у нуклеарној физици и астрофизици. Чињеница је да у постојећим експерименталним условима није, на пример, могуће у нашој земљи добити метални водоник. Међутим, постоји мноштво материјала у којима се фазни прелази и драстичне

промене особина дешавају на притисцима који су нашим истраживачима доступни. Испитивања неких таквих материјала врше се у сарадњи за водећим светским лабораторијама. Са тачке гледишта астрофизике, постојећи експериментални услови допуштају симулацију стања у плитким слојевима испод површине неких планета и астероида. На теоријском плану, услови за рад су чак и бољи него у домену експеримената, пошто нерешених проблема има у распону од гравитационог колапса до објашњавања резултата експериманата у дијамантским пресама. Надамо се да је овај рад успео да читаоцу пренесе уверење да су физика и астрофизика густе материје узбудљиве научне области у бурном развоју, и да ће крајњи ефекат рада бити пораст интересовања за ову врсту истраживања.

### Напомена

Захваљујем се колеги Др. Браниславу Јованићу, научном сараднику Института за физику, на корисним сугестијама о ранијој верзији овог рада.

### Референце

- Adams, D. M. and Sharma, S. K.: 1977, *J. Phys.* **E10**, 680.  
Ashcroft, N. W.: 1989, *Nature*, **340**, 345.  
Auban, P., Čelebonović, V., Tomić, S., Jerome, D. and Bechgaard, K.: 1991, *Synth. Metals*, **41-43**, 2281.  
Barbee, T. W., Garcia, A. and Cohen, M. L.: 1989, *Nature*, **340**, 369.  
Bizhigitov, T. B. and Sirota, N. N.: 1986, *JETP Letters*, **44**, 417.  
Bridgman, P. W.: 1964, Collected Experimental Papers, Volumes I - VII, Harvard University Press, Cambridge, Mass., USA.  
Čelebonović, V.: 1986, *Earth, Moon and Planets*, **34**, 59.  
Čelebonović, V.: 1988, *ibid*, **42**, 297.  
Čelebonović, V.: 1989d, *ibid*, **45**, 291.  
Čelebonović, V.: 1990, *Vasiona*, **XXXVIII**, (1), 1.  
Čelebonović, V.: 1992a, *Europhys. Conf. Abstracts*, **16A**, 143.  
Čelebonović, V.: 1992b, *Bull. Astron. Belgrade*, **146**, 41.  
Čelebonović, V.: 1992c, *Earth, Moon and Planets*, **58**, 203.  
Čelebonović, V.: 1993b, *Publ. Obs. Astron. Belgrade*, **44**, 103.  
Eggert, J. H., Goettel, K. A. and Silveira, I. F.: 1989, *Phys. Rev.*, **B 40**, 5733.  
Eliezer, S., Ghatak, A., and Hora, H.: 1986, An introduction to equations of state: theory and applications, Cambridge University Press, Cambridge, Great Britain.  
Fabre, D. and Thiery, M. M.: 1984, *J. de Physique*, Coll. C-8, 405.  
Forman, R. A., Piermarini, G. J., Barnett, J. D. and Block, S.: 1972, *Science*, **176**, 284.

- de Groot, S. R. and Suttorp, L. G.: 1972, *Foundations of Electrodynamics*, North Holland Publ. Comp., Amsterdam.
- Hama, J., Shiomi, Y. and Suito, K.: 1990, *J. Phys.: Cond. Matt.*, **2**, 8107.
- Hemley, R. J., Jephcoat, A. P., Mao, H. K., Zha, C. S., Finger, L. W. and Cox, D. E.: 1987, *Nature*, **330**, 737.
- Hemmes, H., Driessens, A. and Griessen, R.: 1986, *Physica*, **139 & 140 B**, 116.
- Hirsch, K. R. and Holzapfel, W. B.: 1981, *Rev. Sci. Instr.*, **52**, 52.
- Jakšić, Z. M., Urošević, V. V., Zeković, Lj. and Jovanić, B. R.: 1992, *High Pressure Research*, **9**, 247.
- Jamieson, J. C., Lawson, A. W. and Nachtrieb, N. D.: 1959, *Rev. Sci. Instr.*, **30**, 611.
- Jayaraman, A.: 1983, *Rev. Mod. Phys.*, **55**, 65.
- Jayaraman, A.: 1986, *Rev. Sci. Instr.*, **57**, 1013.
- Jovanić, B., Zeković, Lj. and Radenković, B.: 1991, *Phys. Scripta*, **43**, 446.
- Jovanić, B. R.: 1992a, *Meas. Sci. Technol.*, **3**, 979.
- Jovanić, B. R.: 1992b, *Chem. Phys. Lett.*, **190**, 440.
- Kaiser, W. and Bond, W. L.: 1959, *Phys. Rev.*, **115**, 857.
- Laštovičkova, M.: 1991, *Phys. Earth Planet. Inter.*, **66**, 1.
- Lawson, A. W. and Tang, T. Z.: 1950, *Rev. Sci. Instr.*, **21**, 815.
- LeBellac, M.: 1988, Des phénomènes critiques aux champs de jauge, InterEditions / Editions du CNRS, Paris.
- Leung, Z.: 1984, Physics of Dense Matter, Science Press and World Scientific Publishing, Beijing / Singapore.
- Linde, A. D.: 1990, Particle Physics and Inflationary Cosmology, Harwood Academic Publishers, London.
- Ma, D., Zheng, X., Xu, Z. and Zhang, Y.: 1986, *Phys. Lett.*, **115A**, 245.
- Ma, D., Zheng, X., Zhang, Y. and Xu, Z.: 1987, *Phys. Lett.*, **121A**, 97.
- Ma, D., Chen, J., Wang, Y. and Zhang, Y.: 1988, *Phys. Lett.*, **126A**, 377.
- Ma, D., Wang, Y., Chen, J. and Zhang, Y.: 1988, *J. Phys.*, **C21**, 3585.
- Mao, H. K., Bell, P. M., Shaner, J. W. and Steinberg, D. J.: 1978, *J. Appl. Phys.*, **49**, 3276.
- Mao, H. K., and Hemley, R. J.: 1989, *Science*, **244**, 1462.
- Mao, H. K., Goettel, K. A. and Bell, P. M.: 1985, in: Solid State Physics under Pressure: Recent Advances with Anvil Devices (ed. by S. Minomura), p. 11, KTK Scientific Publishers, Tokyo, Japan, and D. Reidel Publ. Comp, Dordrecht, Holland.
- Negele, J. W. and Orland, H.: 1988, Quantum Many-Particle Systems, Addison-Wesley Publ. Comp., New York.
- Palstra, T. T. M., Zhou, O., Iwasa, Y. et al.: 1995, *Solid State Comm.*, **93**, 327.
- Piermarini, G. J. and Block, S.: 1975, *Rev. Sci. Instr.*, **46**, 973.
- Polian, A., Besson, J. M. and Grimsditch, M.: 1985, in: Solid State Physics under Pressure: Recent Advances with Anvil Devices (ed. by S. Minomura), p. 93, KTK Scientific Publishers, Tokyo, Japan, and D. Reidel Publ. Comp, Dordrecht, Holland.

- Reichl, L. E.: 1988, A Modern Course in Statistical Physics, Edward Arnold (Publishers) Ltd., London.
- Robertson, R., Fox, J. J. and Martin, A. E.: 1934, *Phil. Trans. Roy. Soc.*, **A232**, 463.
- Ruoff, A. L.: 1992 a, in: Annual Techn. Rep., Mater. Sci. Center, Cornell University, July 1, 1991. - June 30, 1992.
- Ruoff, A. L., Greene, R. G., Ghandehari, K. and Xia, Q.: 1992, Cornell University Mat. Sci. Center Report MSC # 7439.
- Savić, P.: 1961, *Bull. de la classe des Sci. Math. et Natur. de l'Acad. Serbe des Sciences et des Arts*, **26**, 107.
- Savić, P. and Kašanin, R.: 1962/65, The Behaviour of Materials Under High Pressure I - IV, SANU, Beograd.
- Savić, P.: 1981, *Adv. Space Res.*, **1**, 131.
- Savić, P. and Urošević, V.: 1987, *Chem. Phys. Lett.*, **135**, 393.
- Savić, P. and Čelebonović, V.: 1994, in: Proc. of the 1993. Joint AIRAPT/APS Conference on High Pressure Sci. and Technol., AIP Conference Proceedings Series, **309**, p.53, AIP Press., New York.
- Schaeffer, R.: 1992, Supernovae de Type II et assimilees, Saclay preprint SPhT/92-130.
- Schwarzschild, M.: 1958, Structure and Evolution of the Stars, Princeton Univ. Press. Princeton.
- Sewell, G. L.: 1989, Quantum Theory of Collective Phenomena, Clarendon Press, Oxford.
- Stanley, H. E.: 1971, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Clarendon Press, Oxford.
- Tammann, G.: 1900, *Ann. Phys.*, 4 ser., **2**, 1.
- Ter-Kazarian, G. T.: 1992, *Astrophys. Space Sci.*, **194**, 1.
- Trusler, J. P. M.: 1988, *Mol. Phys.*, **64**, 1153.
- Urošević, V., Panić, B., Jovanić, B., Zeković, Lj. and Savić, P.: 1989, *Chem. Phys. Lett.*, **155**, 325.
- Van Valkenburg, A. A.: 1965, Conference Internationale sur les Hautes Pressions, Le Creusot, France.
- Weir, C. E., Lippincott, E. R., Van Valkenburg, A. and Bunting, E. N.: 1959, *J. Res. Natl. Bur. Standards, Sec. A*, **63**, 55.
- Whalley, E.: 1985, in: Ices in the Solar System , ed. by J. Klinger, D. Benest, A. Dollfus and R. Smoluchowski p. 9, D. Reidel Publ. Comp, Dordrecht, Holland.
- Williams, Q., Jeanloz, R., Bass, J., Svendsen, B. and Ahrens, T. J.: 1987, *Science*, **236**, 181.
- Williams, Q. and Jeanloz, R.: 1991, in: Molten Salt Techniques, **4**, ed. by R. J. Gale and D. G. Lovering, p. 193, Plenum Publ. Corp., London.
- Wigner, E. and Huntington, J.: 1935, *J. Chem. Phys.*, **3**, 764.
- Yusa, H., Yagi, T. and Arashi, H.: 1993, Technical report of ISSP (Univ. of Tokyo), **A2682**, (poslato u J. Appl. Phys.).

## Додатак

Главни део овог текста написан је почетком 1993. Истраживања понашања материјала под високим притиском се интензивно одвијају и, упркос познатим политичким мотивисаним проблемима у размени информација са светом, могу се (у смањеном обиму) пратити и из Југославије. Циљ овог додатка је да укратко прикаже неке од резултата постигнутих до почетка 1995., о којима у главном тексту није било речи.

Поменули смо да горња граница применљивости рубинске скале износи око 250 GPa (2.5 Mbar). А колики је највиши притисак доступан у дијамантској преси? Одговор на ово питање је растућа (али, на непредвидив начин) функција времена. По последњим расположивим подацима, истраживачи на Корнеловом Универзитету (Cornell University) у САД достигли су притисак од 560 GPa (5.6 Mbar) (Ruoff et al, 1992; Ruoff, 1993)! Поређења ради, притисак у центру Земље износи око 360 GPa, што илуструје значај овог резултата за геофизику и науку о материјалима. Пошто је достигнута вредност далеко изнад горње границе рубинске скале, мерења на тако великим притисцима раде се анализом дифракције X-зрака на узорцима. Поменути рекорд постигнут је на хемијским елементима W, Pt и Mo, пречник врха дијаманата био је 20  $\mu\text{m}$ , а пречник отвора колиматора X-зрака био је 5  $\mu\text{m}$  (Ruoff et al, 1993), што захтева посебне микро-манипулаторе. Поменимо да, у експериментима који се раде у Институту за физику и многим другим лабораторијама, величина узорка износи око 50  $\mu\text{m}$ , па се ипак сматра за веома "фин" посао поставити такав узорак у пресу. У вези са "фином" експериманата у дијамантским пресама, пажњу заслужују и мерења вискозности флуида у дијамантским пресама. Користећи куглице полистирена пречника 91 nm (или 0.91  $\mu\text{m}$ ) измерена је вискозност метанола под притиском (Herbst, King, Gao and Ou-Yang, 1992). Мерења су извршена на притиску  $P < 2.90 \text{ GPa}$ ; мерењима су добијене вредности кофицијента дифузије као функција притиска, а затим су теоријски израчунате вредности кофицијента вискозности. Тачност коначних резултата износи  $\pm 2.5\%$ , што се у експериментима у међуници флуида сматра за веома високу тачност.

Метални водоник још увек није добијен. Измерен је индекс преламања водоника у функцији притиска, а одређена је и зависност моларне рефракције водоника од густине (Ruoff and Ghosh, 1993). Оба ова резултата омогућују израчунавање притиска метализације водоника, при чему се поново добија "убичајена" вредност од 300 GPa.

Експериментално је одређена једначина стања Al за  $P \leq 220 \text{ GPa}$ , и показано је међусобно слагање резултата добијених ултразвучним, статичким и ударним експериментима. Није детектован структурни фазни прелаз (Greene, Luo and Ruoff, 1994). Могло би се поставити питање зашто је овај експеримент урађен баш на Al а не на неком другом хемијском елементу? Објашњење је прагматично - због једноставне структуре кристалне решетке Al (тзв. FCC тип), теоријска израчунавања су за овај метал "релативно" једноставна, па је он погодан за поређење теоријских и експерименталних резултата.

Поново је демонстрирана применљивост високих притисака у комбинацији

са другим експерименталним техникама на истраживања фазних прелаза (Hochheimer, 1995). Такође су поново дефинисане неке фиксне тачке у скали притиска (то су прецизно одређене тачке фазних прелаза у разним материјалима), које препоручује AIRAPT (Molinar, 1995). Разрађен је и нов вид дијамантске пресе за употребу у јаким магнетним пољима, који се може користити у пољима  $H < 20$  Т на температурама у области постојања течног хелијума (Zeman, Zigone and Martinez, 1995). Очекује се да ће овај инструмент (а тешкоћа у његовом прављењу је у избору немагнетних материјала који уједно могу да поднесу високе притиске и ниске температуре) омогућити нове продоре у истраживањима фазних прелаза у магнетним и суперпроводним материјалима.

На крају, неколико речи о једном необичном материјалу - фулерену  $C_{60}$ . Измерена је специфична топлота монокристала фулерена за  $77 \leq T$  (К)  $\leq 300$  (Devadhasan et al., 1994). Резултати зависе од температуре и показују хистерезис. Максимална измерена вредност специфичне топлоте износи  $16 \text{ J/g/K}$  за  $T = 261.5 \text{ K}$  (што одговара температури на којој се дешава оријентациони фазни прелаз). За  $T < 100 \text{ K}$  уочен је прелаз у тзв. стакласто стање. Одређен је и фазни дијаграм фулерена за услове  $T \leq 300 \text{ K}$  и  $P \leq 1 \text{ GPa}$  (Sundqvist et al., 1995).

Поменимо и један астрофизички важан резултат везан за фулерен. У САД су, у току 1993., рађени експерименти у којима су, из авиона на веома велиkim висинама, захватане међупланетарне честице у близини горње границе атмосфере Земље. Очекивало се да ће најзаступљенији облик угљеника на овом зрним бити управо фулерен. Показало се да су ова предубеђења била потпуно погрешна, пошто ни једна од захваћених честица није садржала фулерен! Овај резултат показује да у савременим знањима о хемији међупланетарне средине постоји неки скривен или озбиљан проблем, што би могло имати импликације и на развој теоријских представа о стварању планета и звезда.

### Референце

- Devadhasan, K. V., Natarjan, D. V., Sastry, V. S. et al.: 1994, *Solid State Comm.*, **92**, 715.  
Greene, R. G., Luo, H. and Ruoff, A. L.: 1994, *Phys. Rev. Lett.*, **73**, 2075.  
Herbst, C. A., King, H. E., Jr., Go, Z. and Ou-Yang, H. D.: 1992, *J. Appl. Phys.*, **72**, 838.  
Hochheimer, H. D.: 1995, u knjizi: Proceedings of the XXXII EHPRG Conference, Brno, Czech Republic, 29. 08. - 01. 09. 1994.  
Molinar, G. F.: 1995, isto.  
Ruoff, A. L., Xia, H. and Xia, Q.: 1992, *Rev. Sci. Instr.*, **73**, 4342.  
Ruoff, A. L.: 1993, in: Ann. Techn. Rep. Mat. Sci. Ctr. Cornell University for the period July 1, 1992 - June 30, 1993., p. 278.  
Ruoff, A. L., Luo, H., Xia, H. and Vanderborgh, C.: 1993, Mat. Sci. Ctr. Cornell University, MSC Report # 7659.  
Ruoff, A. L. and Ghandehari, K.: 1993, *Mod. Phys. Lett.*, **7**, 907.

- Sundqvist, B, Andersson, O. Lundin, A. and Soldatov, A.: 1995, *Solid State Comm.*, **93**, 109.  
Zeman, J., Zigone, M. and Martinez, G.: 1995, u knjizi: Proceedings of the XXXII EHPRG Conference, Brno, Czech Republic, 29. 08. - 01. 09. 1994.

**DENSE MATTER PHYSICS AND ASTROPHYSICS:  
SOME RESULTS AND SOME PROBLEMS**

VLADAN ČELEBONOVIĆ

*Institute of Physics, Pregrevica 118, 11080 Zemun*

**Abstract.** The mass density of materials occurs as a parameter in various domains of physics and astrophysics, from experiments in diamond-anvil cells to the gravitational collapse and the early universe. This paper has a double purpose: to review the basic results concerning the behaviour of materials under high pressure, and to point out some open problems. Special attention is given to results obtained in this country.