

УДК 532.593

ШИРОКОДИАПАЗОННОЕ МНОГОФАЗНОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ЖЕЛЕЗА

А. Б. Медведев

РФЯЦ, ВНИИ экспериментальной физики, 607188 Саров, postmaster@ifv.vniief.ru
Саровский физико-технический институт — филиал Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ», 607186 Саров

Построено полуэмпирическое уравнение состояния железа с учетом пяти конденсированных фаз (α , γ , δ , ε , жидкость), испарения и термической ионизации. Результаты модельных расчетов в целом согласуются с данными статических и динамических экспериментов в диапазоне давления от атмосферного до ≈ 10 ТПа и в диапазоне температуры от комнатной до $\approx 10^5$ К. С применением модели жидкости выполнены оценки вязкости жидкого железа в условиях, характерных для ядра Земли.

Ключевые слова: железо, уравнение состояния, фазовая диаграмма, плавление, испарение, ударная адиабата, изотерма, скорость звука, вязкость.

ВВЕДЕНИЕ

Уравнение состояния (УРС) железа требуется при решении различных задач высокоскоростного удара, геофизики и др. При этом для расчета ряда высокоинтенсивных процессов необходимо совместное отражение в УРС таких явлений, как фазовые переходы в твердом состоянии, плавление, испарение и ионизация. На практике, ввиду трудностей теоретического описания свойств конденсированных веществ, при построении соответствующих УРС используют полуэмпирические модели со свободными параметрами, которые подбирают на основе доступных экспериментальных данных.

Относительно широкодиапазонные полуэмпирические УРС железа конструировались в работах [1–13]. Они различаются областями применимости. Уравнения [3, 10, 13], направленные на детальное описание свойств твердых и жидкой фаз, применимы при сравнительно невысоких температуре T и давлении P (в частности, в УРС [13] максимально допустимые значения $P \approx 350$ ГПа, $T \approx 7000$ К). Другие УРС охватывают более широкую область параметров, но им присущи свои недостатки. В [1, 2] не различаются свойства жидкости и твердой фазы (отсутствует учет плавления). В [4–6, 12] не отражена многофазность твердого состояния. Уравнения [8, 9] не учи-

тывают испарения и требуют улучшения в области существования твердых фаз. В [7] испарение учитывается весьма грубо (критическая температура $\approx 25\,000$ К далека от оценок других авторов) и, кроме того, уравнение требует некоторой корректировки (в свете современных данных по фазовой диаграмме) в области твердого состояния вещества. В исходном варианте УРС [11] испарение не учитывается, поскольку для описания жидкости используется однофазная модель [14]. В УРС [15], основанном на [11], испарение отражено, но способ его учета не приведен. Наиболее корректным из названных выше представляется УРС [11, 15]. К сожалению, оно описано очень кратко, его параметры не даны, сравнение с имеющимися данными ударно-волновых опытов неполное.

В настоящей работе построено полуэмпирическое УРС железа с учетом пяти конденсированных фаз, испарения и термической ионизации. Результаты модельных расчетов сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными, полученными в статических и динамических опытах. Расчетные характеристики параметров критической точки перехода жидкость — газ сопоставлены с результатами других авторов. Наряду с УРС, значительный интерес представляют также реологические свойства железа, в частности его вязкость. В работе проведены оценки сдвиговой вязкости жидкого железа и их сравнение с другими данными.

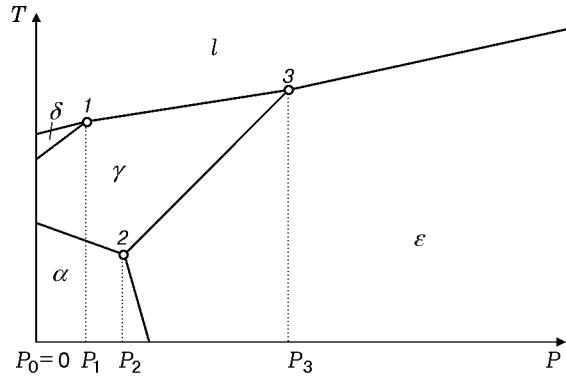


Рис. 1. Фазовая диаграмма железа в координатах температура — давление

СПОСОБ ПОСТРОЕНИЯ МНОГОФАЗНОГО УРС

В конденсированном состоянии учитывалось наличие четырех твердых фаз (α , γ , δ , ε) и жидкости (l). Схематически рассматриваемая фазовая диаграмма показана на рис. 1.

В многофазном УРС железа для описания жидкой фазы при умеренной (на сравнительно небольшом удалении от линии плавления) температуре применялась модифицированная модель Ван-дер-Ваальса (модель мВдВ) [4–6, 16, 17] без учета ионизации. Термическое УРС представлено в следующей параметрической (с использованием внутренней переменной P^{rep}) форме:

$$P = P^{rep} + P^{att}(V, T), \quad (1)$$

$$P^{rep} = \frac{RT}{V - V_C(P^{rep})}, \quad (2)$$

где V — удельный объем ($\rho = 1/V$ — плотность), $R = 8.3145 \cdot 10^{-3}/W$ кДж/(г·К), $W = 55.85$ — атомная масса, $P^{att}(V, T)$ — «давление притяжения» (в модели ВдВ $P^{att}(V) = -a/V^2$, $a = \text{const}$), P^{rep} — «давление отталкивания», V_C — коволюм. В модели ВдВ $V_C = \text{const}$, в уравнении (2) $V_C = V_C(P^{rep})$. Функции $P^{att}(V, T)$ и $V_C(P^{rep})$ — эмпирические.

При использовании вместо $V_C(P^{rep})$ обратной для нее функции $P^{rep}(V_C)$ соотношения (1), (2) в переменных T , V_C принимают вид

$$P = P^{rep}(V_C) + P^{att}(V, T), \quad (3)$$

$$V = V_C + \frac{RT}{P^{rep}(V_C)}. \quad (4)$$

Из (4) при $T = 0$ следует, что $V = V_C$, и тогда уравнение (3) определяет давление на «холодной» кривой:

$$P_x(V) = P^{rep}(V) + P^{att}(V, T = 0), \quad (5)$$

которое является функцией плотности. В результате модель мВдВ применима в области сжатия жидкости (в отличие от исходной модели ВдВ).

Свободная энергия F определяется (в собственных для нее переменных V , T , совместно с формулой (2)) выражением

$$F = E^{rep}(P^{rep}) + E^{att}(V, T) -$$

$$- RT \ln \left(\frac{eT^{5/2} r \sigma_0(T)}{P^{rep}} \right), \quad (6)$$

где

$$E^{rep} =$$

$$= - \int_0^{P^{rep}} P^{rep} \left(\frac{dV_C(P^{rep})}{dP^{rep}} \right) dP^{rep}, \quad (7)$$

$$E^{att} = - \int_{\infty}^V P^{att}(V, T) dV, \quad (8)$$

$e = 2.718 \dots$, $r = k^{5/2} (m/2\pi\hbar^2)^{3/2}$, k — постоянная Больцмана, m — масса атома, \hbar — постоянная Планка, $\sigma_0(T)$ — внутренняя статистическая сумма индивидуального атома. Интегрирование в (8) проводится при $T = \text{const}$.

При $V \rightarrow \infty$ модель (2), (6) представляет собой УРС идеального одноатомного газа. При $V_C = \text{const}$ она переходит в модель ВдВ и также, как и последняя, отражает испарение жидкости.

С помощью (2), (6) рассчитывается энтропия $S = -(\partial F/\partial T)_V$

$$S = \int_{\infty}^V \left(\frac{\partial P^{att}}{\partial T} \right) dV + R \ln \left(\frac{T^{5/2} r \sigma_0(T)}{P^{rep}} \right) + R \frac{d \ln(T^{5/2} r \sigma_0(T))}{d \ln T}, \quad (9)$$

давление $P = -(\partial F/\partial V)_T$ (выражение для P совпадает с (1)), внутренняя энергия $E = F + TS$ и потенциал Гиббса $\Phi = E - TS + PV$.

Наиболее удобными переменными модели (2), (6) являются P^{rep}, T . Сначала по ним из (2) находится $V = V(P^{rep}, T)$, а затем по введенным формулам — $P = P(P^{rep}, T)$, $F = F(P^{rep}, T)$, $S = S(P^{rep}, T)$, $\Phi = \Phi(P^{rep}, T)$ и т. д. Исключение переменной P^{rep} приводит к обычным связям, например: $V = V(P, T)$, $S = S(P, T)$, $\Phi = \Phi(P, T)$.

Модель конкретизируется функциями $P^{att}(V, T)$, $V_C(P^{rep})$, $\sigma_0(T)$. Далее в процедуре построения многофазного УРС они считаются заданными (см. следующий параграф), т. е. УРС жидкости определено.

Для УРС твердых фаз используется модель сжимаемого коволюма [18] (формулы подчиняются соотношениям $V = (\partial\Phi/\partial P)_T$, $S = -(\partial\Phi/\partial T)_P$):

$$V^i = V_C^i(P) + \frac{RT}{P + P_*^i}, \quad (10)$$

$$S^i = S_0^i + \int_{T_0}^T \frac{C_P^i(T')}{T'} dT' - R \ln \left(1 + \frac{P}{P_*^i} \right), \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \Phi^i = \Phi_0^i + \int_0^P V_C^i(P) dP + RT \ln \left(1 + \frac{P}{P_*^i} \right) - \\ - \int_{T_0}^T \left(\int_{T_0}^{T'} \frac{C_P^i(T'')}{T''} \right) dT' - S_0^i(T - T_0). \quad (12) \end{aligned}$$

Здесь $i = \alpha, \gamma, \delta, \varepsilon$; $T_0 = 298$ К; $C_P^i(T) = T(\partial S^i/\partial T)_P$ — изобарическая теплоемкость при $P = 1$ атм (далее малым отличием свойств конденсированного вещества при $P = 1$ атм и $P = 0$ пренебрегаем); $V_C^i(P)$ — коволюмы твердых фаз (определяющие их объем при $T = 0$); $P_*^i, S_0^i, \Phi_0^i = \text{const}$ (параметр P_*^i контролирует коэффициент теплового расширения при относительно небольшом давлении, в частности при $P = 0$). УРС i -й фазы в виде (10)–(12) конкретизируется величинами $P_*^i, S_0^i,$

$C_P^i(T)$ и $\Phi_C^i(P) = \Phi_0^i + \int_0^P V_C^i(P) dP$ (в (10) — $V_C^i(P) = \frac{d\Phi_C^i(P)}{dP}$). Наиболее удобными переменными УРС являются P, T .

При термодинамическом равновесии фаз равны их потенциалы Гиббса:

$$\Phi^i(P, T) = \Phi^j(P, T), \quad (13)$$

где $i, j = \alpha, \gamma, \delta, \varepsilon, l$. Следствием (13) является уравнение Клапейрона — Клаузиуса

$$\frac{dT^{ij}(P)}{dP} = \frac{V^j - V^i}{S^j - S^i}, \quad (14)$$

где $T^{ij}(P)$ — температура на линии равновесия фаз i и j (удовлетворяющая уравнению (13)), величины V и S относятся к состояниям на линиях $T^{ij}(P)$.

При конструировании многофазного УРС наряду с УРС жидкости также считаются известными следующие характеристики:

- (a) $V_C^\alpha(P)$ и P_*^α ;
- (b) $V_C^i(P = 0)$ и P_*^i для фаз $i = \gamma, \delta$;
- (c) V_2^ε в точке 2 рис. 1 и P_*^ε ;
- (d) $C_p^i(T)$ для фаз $i = \alpha, \gamma, \delta, \varepsilon$;
- (e) линии фазового равновесия $T^{l\delta}(P), T^{\delta\gamma}(P), T^{l\gamma}(P), T^{\gamma\varepsilon}(P), T^{l\varepsilon}(P)$ на рис. 1;
- (f) $T^{\gamma\alpha}$ и $dT^{\gamma\alpha}(P)/dP$ при $P = 0$ (конкретизацию этих параметров и функций см. в следующем параграфе).

Исходная информация позволяет, в частности, определить константы S_0^i и $\Phi_0^i = \Phi_C^i(P = 0)$ в (11), (12) для фаз $i = \delta, \gamma, \alpha$. Первые находятся из уравнений (14), рассматриваемых на изобаре $P = 0$ последовательно при температурах $T^{l\delta}, T^{\delta\gamma}, T^{\gamma\alpha}$ (с применением при этом УРС жидкости и уравнений (10), (11); в процедуре используется ряд данных, содержащихся в (a), (b), (d), (e), (f)). Набор вторых констант находится аналогичным способом из уравнений (13).

УРС α -фазы (10)–(12) теперь полностью определено. Окончательное определение УРС δ - и γ -фаз требует знания зависимостей $\Phi_C^i(P)$ в (12). В диапазоне $P = P_0 \div P_1$ (см. рис. 1; $P_0 = 0$) функция $\Phi_C^\delta(P)$ выражается из уравнения $\Phi^l(P, T) = \Phi^\delta(P, T)$, где $T = T^{l\delta}(P)$, функция $\Phi_C^\gamma(P)$ — из уравнения $\Phi^\delta(P, T) = \Phi^\gamma(P, T)$, где $T = T^{\delta\gamma}(P)$ (уравнение состояния $\Phi^\delta(P, T)$ уже определено). В интервале $P = P_1 \div P_3$ зависимость $\Phi_C^\gamma(P)$ рассчитывается из уравнения $\Phi^l(P, T) = \Phi^\gamma(P, T)$, где $T = T^{l\gamma}(P)$.

Линия равновесия $T^{\gamma\alpha}(P)$ при $P = P_0 \div P_2$ определяется численно из уравнения

$\Phi^\gamma(P, T) = \Phi^\alpha(P, T)$ (путем перебора T при $P = \text{const}$).

Пересечение линий $T^{\gamma\alpha}(P)$ и $T^{\gamma\varepsilon}(P)$ фиксирует параметры P_2, T_2 точки 2 (см. рис. 1). С помощью V_2^ε (задано) и V_2^γ, S_2^γ (рассчитываются по известному на участке $P = P_0 \div P_3$ УРС γ -фазы) из уравнения (14), применимого на линии $T^{\gamma\varepsilon}(P)$ в точке 2, находится S_2^ε , затем из (11) — S_0^ε . После этого из уравнения $\Phi^\gamma(P, T) = \Phi^\varepsilon(P, T)$, где $T = T^{\gamma\varepsilon}(P)$ ($P = P_1 \div P_3$), и уравнения $\Phi^l(P, T) = \Phi^\varepsilon(P, T)$, где $T = T^{l\varepsilon}(P)$ ($P \geq P_3$), выражается $\Phi_C^\varepsilon(P)$.

Линия равновесия $T^{\varepsilon\alpha}(P)$ при $P \geq P_2$ находится при численном решении уравнения $\Phi^\varepsilon(P, T) = \Phi^\alpha(P, T)$.

Для фаз $i = \delta, \gamma, \varepsilon$ коволюмы $V_C^i(P)$ в (10) можно рассчитать как дифференцированием функций $\Phi_C^i(P)$, так и следующим, более простым способом. Например, в диапазоне $P = P_0 \div P_1$ из уравнения (14) находится объем $V^\delta(P)$ на линии плавления $T^{l\delta}(P)$ (с привлечением известных величин $dT^{l\delta}(P)/dP, V^l(P, T^{l\delta}(P)), S^l(P, T^{l\delta}(P)), S^\delta(P, T^{l\delta}(P))$). По нему из (10) определяется $V_C^\delta(P) = V^\delta(P) - RT^{l\delta}(P)/(P + P^*)$. Коволюм $V_C^\gamma(P)$ при $P = P_0 \div P_1$ находится аналогичной процедурой, реализуемой на линии равновесия $T^{\delta\gamma}(P)$ (с использованием уже найденной величины $V_C^\delta(P)$). Аналогичный алгоритм определения $V_C^i(P)$ для $i = \gamma, \varepsilon$ применим в интервалах $P = P_1 \div P_3$ и $P \geq P_3$.

В рассматриваемой процедуре значения $V_C^i(P)$ для $i = \delta, \gamma, \varepsilon$ зависят от первых производных соответствующих линий равновесия, а значения $dV_C^i(P)/dP$ — и от их вторых производных. Из-за этого коволюмы и их производные для γ -фазы в точке 1 и для ε -фазы в точке 3 (см. рис. 1) могут быть разрывными. В частности, значения $V_C^\gamma(P_1)$ и $(dV_C^\gamma(P)/dP)_{P=P_1}$ на участках $P = P_0 \div P_1$ и $P = P_1 \div P_3$ не равны, если линии равновесия $T^{l\delta}(P), T^{\delta\gamma}(P)$ фиксированы, а значения начальных производных $(dT^{l\gamma}(P)/dP)_{P=P_1}, (d^2T^{l\gamma}(P)/dP^2)_{P=P_1}$ линии $T^{l\gamma}(P)$ произвольны. Чтобы избежать этого, значения $(dT^{l\gamma}(P)/dP)_{P=P_1}$ и $(d^2T^{l\gamma}(P)/dP^2)_{P=P_1}$ определялись из уравнений, выражающих непрерывность функций $V_C^\gamma(P)$ и $dV_C^\gamma(P)/dP$ при $P = P_1$ (при известных значениях этих функций слева, рассчитываемых с привлечением заданных ли-

ний равновесия $T^{l\delta}(P)$ и $T^{\delta\gamma}(P)$). В частности, $(dT^{l\gamma}(P)/dP)_{P=P_1} = (V_1^l - V_1^\gamma)/(S_1^l - S_1^\gamma)$, где V_1^l, S_1^l находятся из УРС жидкости, S_1^γ — из (11), V_1^γ — из УРС γ -фазы, известном на участке $P = P_0 \div P_1$. Параметры функции $T^{l\gamma}(P)$ выбирались так, чтобы воспроизвести эти начальные производные. Аналогичная процедура, обеспечивающая непрерывность $V_C^\varepsilon(P)$ и $dV_C^\varepsilon(P)/dP$ при $P = P_3$, реализуется в точке 3 (см. рис. 1) для функции $T^{l\varepsilon}(P)$ при фиксированных линиях равновесия $T^{l\gamma}(P), T^{\gamma\varepsilon}(P)$.

Отметим, что зависимости $\Phi_C^\alpha(P)$ и $V_C^\alpha(P)$ можно определить способом, используемым для других твердых фаз при заданных функциях $T^{\gamma\alpha}(P)$ и $T^{\varepsilon\alpha}(P)$. Однако не удастся подобрать для них аналитические функции, обеспечивающие монотонность зависимости $V_C^\alpha(P)$. Этим и обусловлено определение $V_C^\alpha(P)$ непосредственно (см. далее выражение (19)), что несколько усложняет многофазное УРС, поскольку линии $T^{\gamma\alpha}(P)$ и $T^{\varepsilon\alpha}(P)$ рассчитываются численно.

Описанная схема полностью определяет (при оговоренных выше исходных данных) многофазное УРС. Его наиболее удобными переменными, как и для УРС жидкости, являются величины P^{rep}, T при условии, что линии плавления $T^{l\delta}(P), T^{l\gamma}(P), T^{l\varepsilon}(P)$ (см. рис. 1), которые задействованы в процедуре расчета функций $\Phi_C^i(P)$ и $V_C^i(P)$ для фаз $i = \delta, \gamma, \varepsilon$, представлены в параметрическом виде посредством функций $T^{l\delta}(P^{rep}), T^{l\gamma}(P^{rep}), T^{l\varepsilon}(P^{rep})$ в диапазонах $P^{rep} = P_0^{rep} \div P_1^{rep}, P^{rep} = P_1^{rep} \div P_3^{rep}$ и $P^{rep} \geq P_3^{rep}$ соответственно (на рис. 1 им соответствуют диапазоны $P = P_0 \div P_1, P = P_1 \div P_3$ и $P \geq P_3$). С помощью этих трех функций из (1), (2) определяются соотносимые с ними три функции давления плавления $P(P^{rep})$ (например, в интервале $P = P_0 \div P_1$ температуре $T^{l\delta}(P^{rep})$ отвечает давление $P(P^{rep}, T^{l\delta}(P^{rep}))$), после чего восстанавливаются обычные связи $T^{l\delta}(P), T^{l\gamma}(P), T^{l\varepsilon}(P)$. Если при заданной переменной P^{rep} значение переменной T больше соответствующей температуры плавления (например, $T > T^{l\varepsilon}(P^{rep})$), то расчеты проводятся на основе УРС жидкости, в противном случае — по УРС твердого вещества (10)–(12), где $P = P(P^{rep})$ на соответствующей линии плавления. Фаза, отвечающая переменной T , выбирается исходя из сопоставления ее значения с температурами $T^{ij}(P)$. В

областях смеси фаз УРС строится на основе аддитивных соотношений для экстенсивных характеристик $V, S, E = \Phi - TS + PV$.

КОНКРЕТИЗАЦИЯ УРС ЖЕЛЕЗА

Приведем выражения для функций, определяющих многофазное УРС Fe, и их параметры (без указания размерности; при подстановке параметров в соответствующие формулы основные величины имеют размерность: P, P^{rep}, P^{att} — ГПа; V, V_C — см³/г; $C_p(T), S$ — кДж/(г·К); Φ, E — кДж/г; T — К).

Для давления притяжения в (1), (8) использовалось выражение

$$P^{att}(V, T) = -A \frac{\chi \exp(-\lambda T) + 1}{\chi + 1} \left(\frac{V_{00}}{V} \right)^n \quad (15)$$

с параметрами $A = 44.5380, \chi = 0.25, \lambda = 0.00065, V_{00} = 0.12515, n = 1.66608$.

В (2), (7) коволюм $V_C(P^{rep})$ представлен различными функциями на трех участках (на их границах функции «сшиты» по их значениям, первым и вторым производным):

$$0 < P^{rep} < P_{1,0}^{rep} = 84.622:$$

$$V_C(P^{rep}) = V_{00} \left(1 - \frac{\ln(P^{rep}/A)}{\nu} \right), \quad (16)$$

где A, V_{00} — константы в (15), $\nu = 5.21887$;

$$P_{1,0}^{rep} < P^{rep} < P_{2,0}^{rep} = 140.0:$$

$$V_C(P^{rep}) = \frac{v_1}{(P^{rep})v_2} + \frac{v_3}{(P^{rep})v_4}, \quad (17)$$

где $v_1 = -618.8784, v_2 = 3.1085, v_3 = 0.31324, v_4 = 0.2350$;

$$P^{rep} > P_{2,0}^{rep}:$$

$$V_C(P^{rep}) = \frac{v_5}{(P^{rep})v_6} + \frac{v_7}{(P^{rep})v_8} + \frac{v_9}{(P^{rep})v_{10}}, \quad (18)$$

где $v_5 = 85.6808, v_6 = 0.75017, v_7 = -111.8992, v_8 = 0.70, v_9 = 29.3731, v_{10} = 0.60$. Функции (16)–(18) позволяют вычислить интеграл (7) аналитически. Соотношения (15), (18), (5) в пределе $V \rightarrow 0$ приводят к выражению $P_x(V) = 1000(Z/(VW))^{5/3}$ ($Z = 26$ — атомный номер Fe), которое выполняется для идеального вырожденного электронного газа.

Статическая сумма в (6) ограничена первым слагаемым, $\sigma_0(T) = 25$ [19].

Использованные значения параметров P_*^i приведены в табл. 1. Для $V_C^i(P = 0)$ приняты значения 0.11908 и 0.12040 при $i = \gamma$ и $i = \delta$ соответственно. Положено $V_2^\varepsilon = 0.11703$. Коволюмом α -фазы задавался формулой

$$V_C^\alpha(P) = \frac{V_{00}^\alpha}{(1 + K_P P/K)^{1/K_P}} \quad (19)$$

с параметрами $V_{00}^\alpha = 0.12579, K = 173, K_P = 5.29$.

Теплоемкости $C_p^i(T)$ при $i = \gamma, \delta, \varepsilon$ представлены в виде

$$C_p^i(T) = C_0^i + C_1^i T. \quad (20)$$

Значения констант C_0^i, C_1^i приведены в табл. 1. Для ε -фазы при высокой температуре представление (20) не применяется (см. конец следующего параграфа). Для теплоемкости магнитной α -фазы использовалось выражение

$$C_p^\alpha(T) = C_0^\alpha + C_1^\alpha T + \frac{DB^2 T \exp(-B(T - T_m))}{(\exp(-B(T - T_m)) + 1)^2}. \quad (21)$$

Первые две константы даны в табл. 1, $D = 0.003, B = 0.02, T_m = 1043$. В случаях (20), (21) интегралы по T в (11), (12) вычисляются явно.

Линии плавления $T^{li}(P^{rep})$ ($i = \delta, \gamma, \varepsilon$) представлены в виде

$$T^{li}(P^{rep}) = P^{rep} V_C(P^{rep}) F^i(P^{rep}) / R, \quad (22)$$

где $V_C(P^{rep})$ определяется формулами (16)–(18), $F^i(P^{rep})$ — выражением

$$F^i(P^{rep}) = f_1^i \exp(-f_2^i(P^{rep} - f_3^i)) +$$

Таблица 1

Некоторые параметры УРС

i	P_*^i	C_0^i	C_1^i	S_0^i
α	30.322	$3.34242 \cdot 10^{-4}$	$3.59910 \cdot 10^{-7}$	$5.1654 \cdot 10^{-4}$
γ	15.940	$4.67192 \cdot 10^{-4}$	$1.08212 \cdot 10^{-7}$	$6.2623 \cdot 10^{-4}$
δ	15.590	$3.7982 \cdot 10^{-4}$	$1.88325 \cdot 10^{-7}$	$6.9436 \cdot 10^{-4}$
ε	16.418	$4.19790 \cdot 10^{-4}$	$0.99610 \cdot 10^{-7}$	$6.0745 \cdot 10^{-4}$

Таблица 2
Параметры в формуле (23)

i	f_1^i	f_2^i	f_3^i	f_4^i	f_5^i
δ	0.01627	0.05344	$7.920 \cdot 10^{-7}$	0.049	30.835
γ	0.03646	0.01504	0	0.02360	37.635
ε	0.00716	0.00935	0	0.02564	129.223

$$+ f_3^i (P^{rep} - f_5^i)^3 + f_4^i \quad (23)$$

с коэффициентами, приведенными в табл. 2. Параметры $f_5^\delta, f_5^\gamma, f_5^\varepsilon$ тождественны параметрам $P_0^{rep}, P_1^{rep}, P_3^{rep}$, упоминавшимся в конце предыдущего параграфа. Значению переменной $P^{rep} = P_0^{rep}$ отвечают $T^{l\delta} = 1811$ и $P = 0$, $P^{rep} = P_1^{rep} - T^{l\gamma} = 1961.5$ и $P = 4.828$ (параметры точки 1 на рис. 1), $P^{rep} = P_3^{rep} - T^{l\varepsilon} = 2840.0$ и $P = 78.019$ (параметры точки 3 на рис. 1).

В случае $P^{rep} \gg f_5^i$ (большие значения P) уравнения (1), (2), (22) и (23) для $i = \varepsilon$ дают следующую связь объема жидкости на линии плавления $V^{m,l}$ с коволюмом $V_C(P^{rep})$:

$$\frac{V^{m,l} - V_C(P^{rep})}{V_C(P^{rep})} = \text{const}, \quad (24)$$

что является [4–6] аналогом критерия плавления Линдемманна.

Линии равновесия $\delta - \gamma$ и $\gamma - \varepsilon$ представлены выражениями $T^{\delta\gamma}(P) = 1667 + 61P$, $T^{\gamma\varepsilon}(P) = T_2 + 39(P - P_2) - 0.1235(P - P_2)^2$, где $T_2 = 751.19$, $P_2 = 9.664$ — параметры точки 2 на рис. 1 (этому значению P_2 на линии плавления $T^{l\gamma}(P^{rep})$, определяемой (22), (23), отвечает $P_2^{rep} = 44.135$).

При $P = 0$ принято $T^{\gamma\alpha} = 1185$, $dT^{\gamma\alpha}/dP = -110$.

Константы S_0^i приведены в табл. 1, $\Phi_0^\alpha = -7.4888$.

В заключение отметим, что значения приведенных определяющих параметров подбирались исходя из оптимального, по возможности, описания многофазным УРС совокупности экспериментальных данных (за исключением данных по ударному сжатию пористого железа, относящихся к жидкому состоянию), которые рассматриваются ниже.

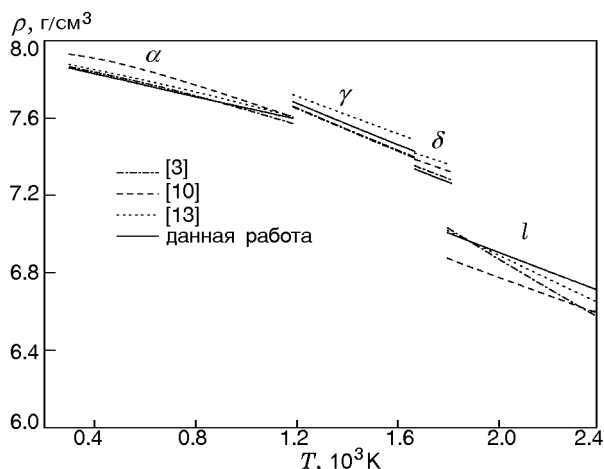


Рис. 2. Зависимость плотности от температуры при нулевом давлении для α -, γ -, δ - и жидкой фаз железа согласно УРС

СРАВНЕНИЕ РАСЧЕТОВ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

На рис. 2 приведены $\rho(T)$ -зависимости при $P = 0$ согласно УРС [3, 10, 13] (как правило, они основаны на непосредственных экспериментальных данных; см. библиографию в [3, 10, 13]) и УРС настоящей работы. Максимальные отличия между ними по плотности составляют $\approx 1\%$.

На рис. 3 представлены зависимости скорости звука $C = \sqrt{(\partial P/\partial \rho)_S}$ от температуры при $P = 0$. Экспериментальные данные для жидкости значительно различаются между собой. УРС [13] по сравнению с УРС данной рабо-

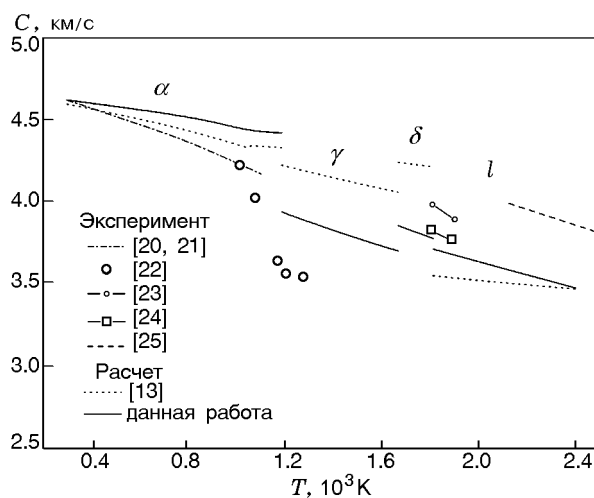


Рис. 3. Зависимость скорости звука от температуры при нулевом давлении для α -, γ -, δ - и жидкой фаз железа

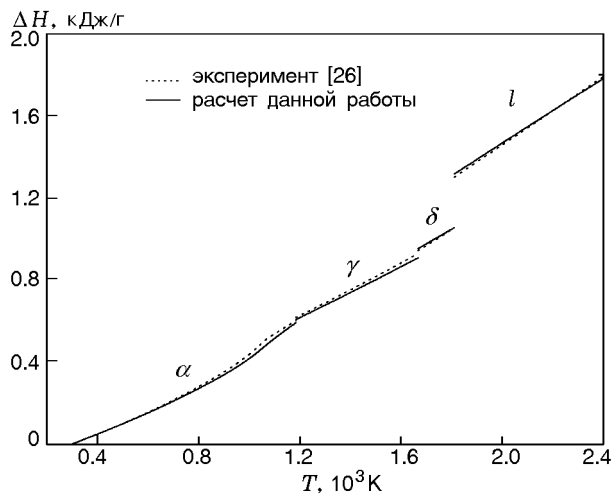


Рис. 4. Зависимость приращения энтальпии от температуры при нулевом давлении для α -, γ -, δ - и жидкой фаз железа

ты лучше описывает эксперимент для α -фазы и хуже для γ -фазы и жидкости.

На рис. 4 показано приращение энтальпии $\Delta H = H - H_0$ (H_0 — энтальпия при $T = 298$ К, $P = 0$) в зависимости от температуры при $P = 0$. Модель согласуется с данными эксперимента на уровне $\approx 1 \div 2$ %, за исключением относительно узкого диапазона температур вблизи $T_m = 1043$ К.

На рис. 5 для жидкой фазы приведены данные (аппроксимация) экспериментов [27, 28] ($P = 0.1$ МПа), [25] ($P = 0.2$ ГПа) и [29] (значение P достигает 0.38 ГПа) для ρ в зависимости

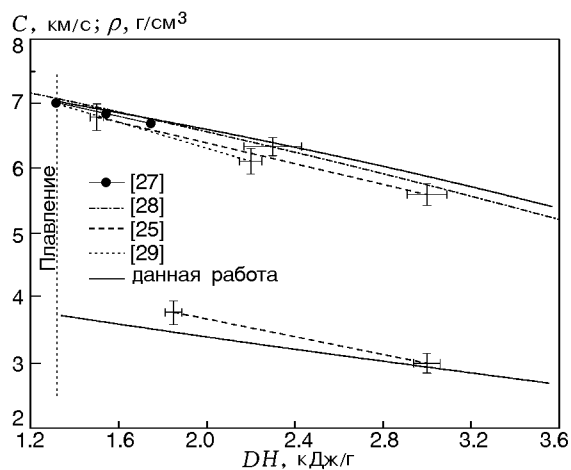


Рис. 5. Зависимость плотности (вверху) и скорости звука (внизу) от приращения энтальпии на изобарах жидкого железа

от ΔH в условиях приблизительно изобарического нагрева, а также данные [25] для скорости звука при $P = 0.2$ ГПа. Расчетные зависимости соответствуют $P = 0.2$ ГПа (расчет при $P = 0.1$ МПа практически не отличается от них до точки кипения, в которой при этом давлении согласно УРС $\Delta H = 2.32$ кДж/г). Экспериментальные данные по плотности различаются между собой. Модельная зависимость в целом находится в соответствии с результатами [27, 28]. Расчетная кривая для скорости звука на относительно небольшом удалении от точки плавления (при $\Delta H \approx 1.3$ кДж/г) проходит ниже экспериментальной. Не исключено, что здесь данные [25] завышены (как видно из рис. 3 их экстраполяция к температуре плавления дает более высокое значение C , чем показывают другие измерения).

На рис. 6 изображена экспериментальная T - P -фазовая диаграмма Fe согласно [30], где обобщены данные статических измерений различных авторов. На рисунке нанесена также точка ($P \approx 13$ ГПа, $T \approx 300$ К) начала перехода $\alpha \rightarrow \epsilon$ согласно ударно-волновым измерениям [31]. Ее параметры отличаются от данных статических измерений. Фазовая диаграмма, построенная согласно рассматриваемому нами УРС, в целом соответствует экспериментальным данным [30] (наиболее значимые отличия имеются в наклонах линий $T^{\epsilon\alpha}(P)$ и $T^{\gamma\epsilon}(P)$).

На рис. 7 приведены экспериментальные

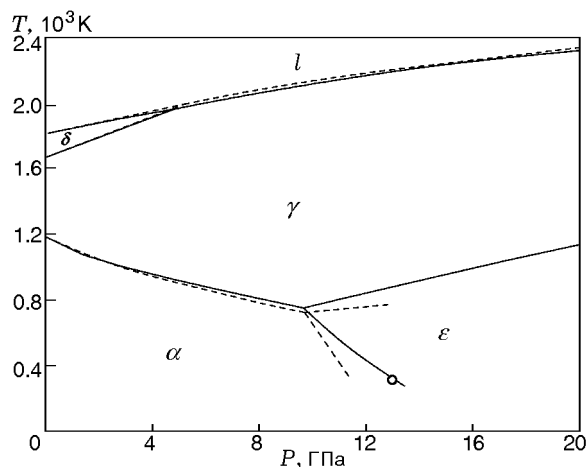


Рис. 6. Фазовая диаграмма железа в координатах температура — давление:

штриховые линии — эксперимент [30], кружок — ударно-волновые параметры перехода $\alpha \rightarrow \epsilon$ из работы [31], сплошные линии — расчет по УРС настоящей работы

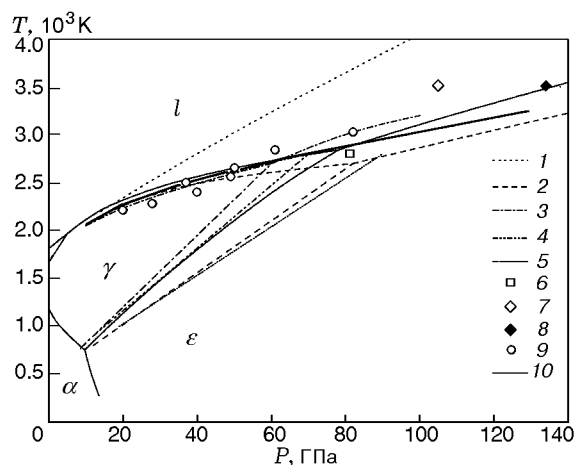


Рис. 7. Фазовая диаграмма железа в координатах температура — давление:

эксперимент: 1 — [32], 2 — [33], 3 — [34], 4 — [35], 5 — [13], 6 — тройная γ - ϵ - l точка [34] при коррекции [36], 7 — точка плавления [37], 8 — точка плавления [37] при коррекции [36], 9 — линия плавления [38]; 10 — расчет по УРС настоящей работы

T - P -фазовые диаграммы (или их отдельные элементы), полученные в статических опытах различными авторами, до $P \approx 100$ ГПа. Точка на кривой плавления ϵ -фазы [37] дана в двух вариантах — исходном (с параметрами $T^{l\epsilon} = 3510$ К, $P = 105$ ГПа) и с учетом коррекции давления (из-за нагрева образца), проведенной в [36] ($P = 134$ ГПа). В [36] также скорректированы параметры γ - ϵ - l тройной точки [34]. Обновленные значения $T = 2800$ К, $P = 81$ ГПа. Данные опытов значительно различаются. При построении показанной на рис. 7 модельной фазовой диаграммы ориентиром служил эксперимент, в котором зарегистрированы относительно высокие (но не максимальные) значения температуры плавления.

На рис. 8 представлены результаты определения температуры ударно-сжатого Fe [32, 39] и соответствующие им кривые плавления. Там же дана статическая линия плавления из работы [33], а также линия плавления из [36]. При построении последней учитывались экспериментальные данные (по плотности фононных состояний ϵ -Fe при $T = 300$ К в диапазоне $P = 30 \div 151$ ГПа [36] и точка плавления [37] с коррекцией [36]) и модельные представления о плавлении Гилвари — Линдемманна. Экстраполяция результатов в диапазон $P > 150$ ГПа осуществлена с помощью формулы Симона.

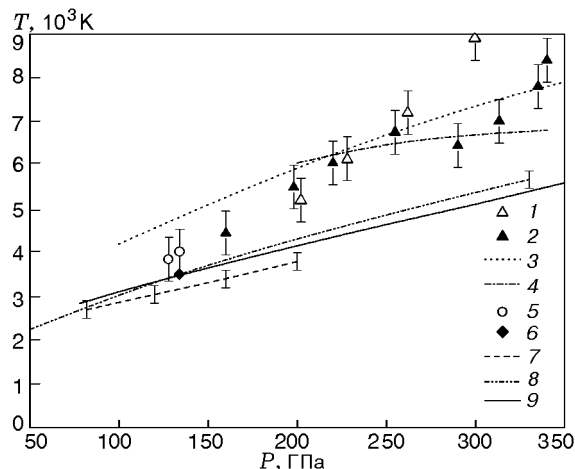


Рис. 8. Зависимость температуры от давления при ударном сжатии и вдоль линии плавления железа:

эксперимент при ударном сжатии: 1 — [32], 2 — [39], 3, 4 — кривые плавления согласно этим работам; 5 — точки на линии плавления согласно данным [40] по ударному сжатию, 6 — точка плавления [37] при коррекции [36], 7, 8, 9 — линии плавления по [33], [36] и УРС настоящей работы

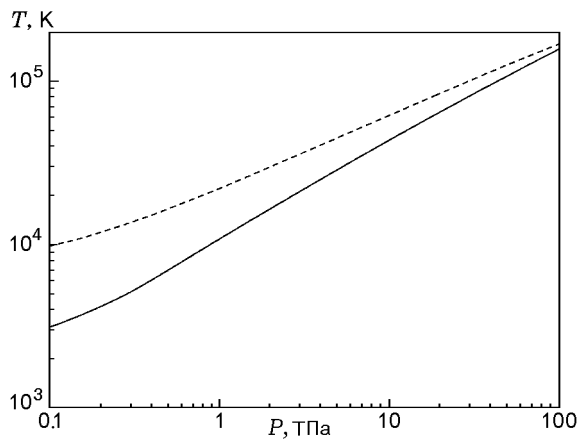


Рис. 9. Зависимость модельной температуры плавления от давления для железа:

сплошная линия — УРС настоящей работы, штриховая — модель [41, 42]

При $P = 330$ ГПа этот способ дает значение $T^{l\epsilon} \approx 5700$ К. Несколько более низкая, согласно [36], температура получена, когда для описания данных в исследованном диапазоне давления и для экстраполяции применяется непосредственно формула Линдемманна. В этом случае $T^{l\epsilon} \approx 5500$ К при $P = 330$ ГПа. Как видно из рисунка, данные статических и динамических параметров плавления значительно рас-

ходятся между собой. Причины различия не ясны. Зависимость $T^{l\varepsilon}(P)$ настоящей работы близка к линии плавления [36] (особенно в ее варианте с опорой на формулу Линдемманна). Ее продолжение представлено на рис. 9, где также показана теоретическая зависимость [41], рассчитанная по модели однокомпонентной плазмы с привлечением модели Томаса — Ферми с поправками [42].

На рис. 10, 11 изображены результаты аппроксимации уравнением Берча — Мурнагана экспериментальных данных по изотермическому ($T \approx 298$ К) статическому сжатию α - и ε -фаз Fe (из работы [44] использованы константы этого уравнения, полученные в ней при совместной обработке результатов [44–46]). Модельные изотермы, полученные по настоящему УРС, согласуются с экспериментом (для ε -Fe расчет ближе всего к данным [35]).

Линия равновесия $T^{\gamma\varepsilon}(P)$, построенная по УРС из данной работы, проходит выше аналогичной зависимости из эксперимента [13] по изотермическому сжатию γ -фазы Fe до $P \approx 80$ ГПа, $T \approx 2400$ К (см. рис. 7). Вследствие этого ρ, P, T -состояния [13] в настоящей модели относятся к области стабильности ε -фазы. Расчетные значения плотности в случае, когда γ -фаза рассматривается как метастабильная, меньше приводимых в [13] на $\approx 1 \div 2$ % (при фиксированных параметрах T, P).

На рис. 10, 11 показаны также экспериментальные и расчетные данные по ударному сжатию сплошного образца железа, которое в исходном (до сжатия) состоянии находится в γ -фазе при $T \approx 1573$ К и в α -фазе при $T \approx 298$ К. Модельные ударные адиабаты определяются из уравнения

$$E = E_0 + \frac{1}{2} P \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right), \quad (25)$$

где ρ_0, E_0 — плотность и энергия вещества согласно УРС перед фронтом ударной волны. Расчетное значение $\rho_0 = 7.858$ г/см³ для α -фазы при $T = 298$ К близко к плотности образцов, используемых в экспериментах ($\rho_0 = 7.85 \div 7.86$ г/см³). Для γ -фазы при $T = 1573$ К согласно УРС $\rho_0 = 7.476$ г/см³, что несколько выше (на 0.8 %) значения $\rho_0 = 7.413$ г/см³, использованного в [48] при определении параметров P, ρ ударного сжатия. По расчету при ударном сжатии γ -фаза сохраняется до $P = 69.86$ ГПа, после чего вещество находится в смеси фаз $\gamma + \varepsilon$ (см. рис. 10). При $P = 78$ ГПа

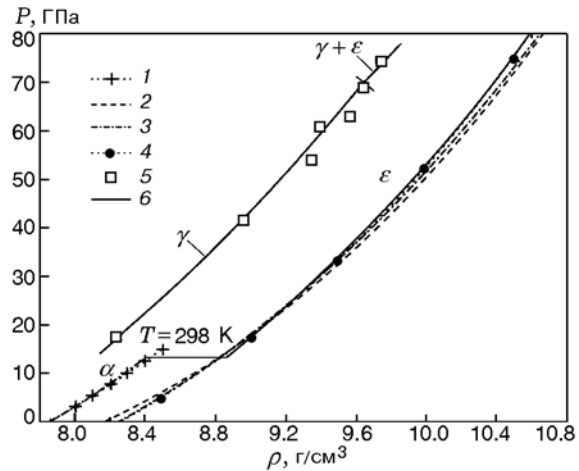


Рис. 10. Зависимость давления от плотности для железа при статическом изотермическом ($T = 298$ К) сжатии α - и ε -фаз и при ударном сжатии γ -фазы:

эксперимент при $T = 298$ К: 1 — [43], 2 — [44], 3 — [47], 4 — [35]; 5 — данные по ударному сжатию [48]; 6 — расчет по УРС данной работы

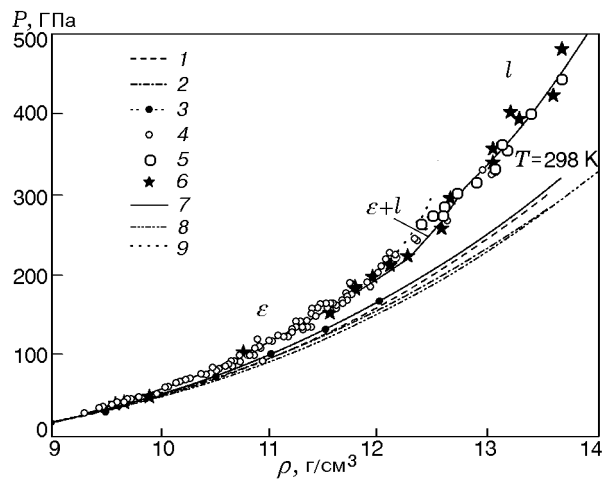


Рис. 11. Зависимость давления от плотности для железа при статическом изотермическом ($T = 298$ К) сжатии ε -фазы и при ударном сжатии исходной α -фазы:

эксперимент при $T = 298$ К: 1 — [44], 2 — [47], 3 — [35]; эксперимент по ударному сжатию: 4 — [50], 5 — [51], 6 — [52]; 7 — расчет по УРС данной работы; 8, 9 — изотерма $T = 298$ К и ударная адиабата жидкой фазы по УРС [13] соответственно

достигается тройная точка γ - ε - l (начало плавления). Согласно экспериментам [49] давление начала плавления равно 71 ГПа. При ударном сжатии исходной α -фазы (см. рис. 11) плавление согласно расчету наступает при 222.2 ГПа,

что близко к экспериментальному значению 225 ГПа [53]. В целом модельные ударные адиабаты на рис. 10, 11 воспроизводят эксперимент в пределах его точности. Отметим, что в УРС [13] давление плавления (≈ 170 ГПа) является заниженным, что, по-видимому, обусловлено низким положением линии плавления (она описывает данные [33] на рис. 8). Как представляется, причиной этого является завышенное значение плотности жидкости в [13] при $T = 298$ К: в диапазоне $P \approx 30 \div 300$ ГПа она больше (см., например, рис. 11) плотности ε -фазы при $T = 298$ К согласно данным [47], которые в [13] использовались при построении УРС ε -фазы. Такое взаиморасположение изотерм сравнительно «рыхлой» жидкости и плотноупакованной твердой фазы маловероятно. УРС настоящей работы показывает обратное. Повышенная плотность жидкости приводит к занижению величины $\Phi^l(P, T = 298) = \Phi_0^l + \int_0^P V^l(P, T = 298) dP$, что снижает

температуру плавления. Ударная адиабата жидкого Fe, рассчитанная по УРС [13] (при $\rho_0 = 7.86$ г/см³) (см. рис. 11), имеет излишне «жесткую» тенденцию, не соответствующую эксперименту при $P \geq 300$ ГПа.

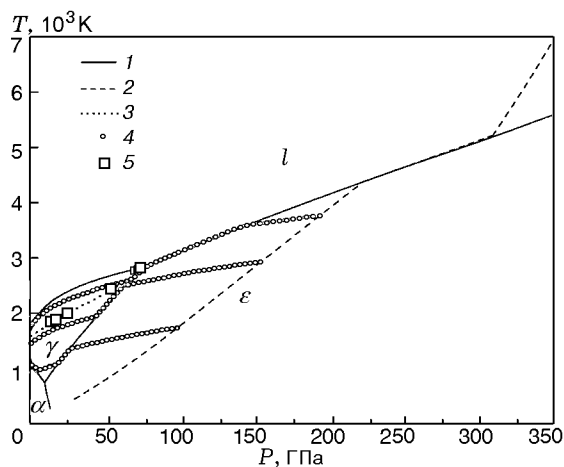


Рис. 12. Модельная зависимость температуры от давления для железа вдоль линий фазового равновесия (1), ударной адиабаты исходной α -фазы (2), ударной адиабаты γ -фазы (3) и трех изэнтроп разгрузки из исходного состояния на ударной адиабате с давлениями 98, 154 и 193 ГПа (4) (5 — оценка температуры ударно-сжатой γ -фазы [49])

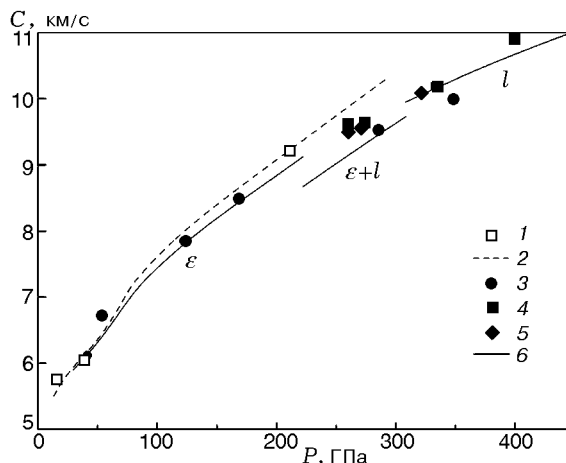


Рис. 13. Зависимость скорости звука от давления для железа при изотермическом ($T = 298$ К) сжатии ε -фазы и ударном сжатии исходной α -фазы:

изотермическое сжатие: 1 — эксперимент [54], 2 — расчет по УРС настоящей работы; ударное сжатие (эксперимент): 3 — [52], 4 — [55], 5 — [53], 6 — расчет по УРС настоящей работы

На рис. 12 показаны зависимости $T(P)$, рассчитанные согласно настоящему УРС, вдоль ударных адиабат, изображенных на рис. 10, 11. Для γ -фазы расчет близок к оценкам температуры [49].

На рис. 13 приведены зависимости $C(P)$ для ε -фазы при $T \approx 298$ К и в состояниях, реализуемых при ударном сжатии исходного α -Fe с начальной плотностью $\rho_0 \approx 7.85$ г/см³ (из работ [53, 55] взяты данные с относительно малым или отсутствующим влиянием прочности на распространение звука). Расчет воспроизводит эксперимент с отклонениями на уровне его погрешности ($\approx 10 \div 15$ % для данных [52] и, как правило, несколько меньше в других случаях).

На рис. 14 изображена зависимость коэффициента теплового расширения $\beta = (\partial V / \partial T)_P / V$ от давления при $T = 298$ К для ε -фазы. Наблюдается согласие расчета с данными экспериментов [56, 57]. На рис. 15 показаны зависимости коэффициента Грюнрайзена $\gamma = V(\partial P / \partial E)_V$ для ε -фазы вдоль изотермы $T = 298$ К и вдоль ударной адиабаты исходного α -Fe начальной плотностью $\rho_0 = 7.85$ г/см³ в ε -, жидком и смесевом ($\varepsilon+l$) состояниях. Расчет для жидкости согласуется с экспериментальными значениями γ из [8] (уточнение исходных данных [55]). Приведены также два значения

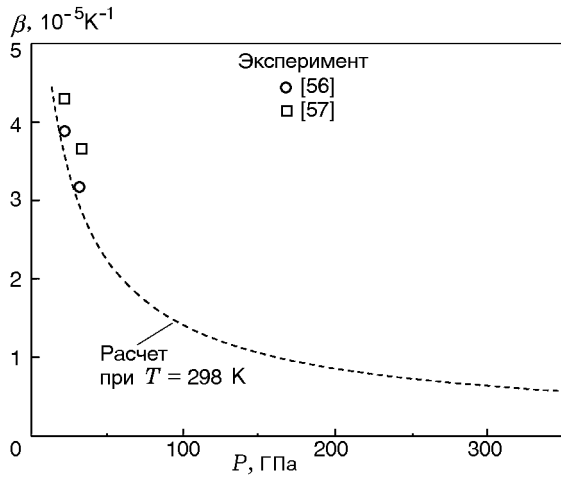


Рис. 14. Зависимость коэффициента теплового расширения от давления для ϵ -фазы железа

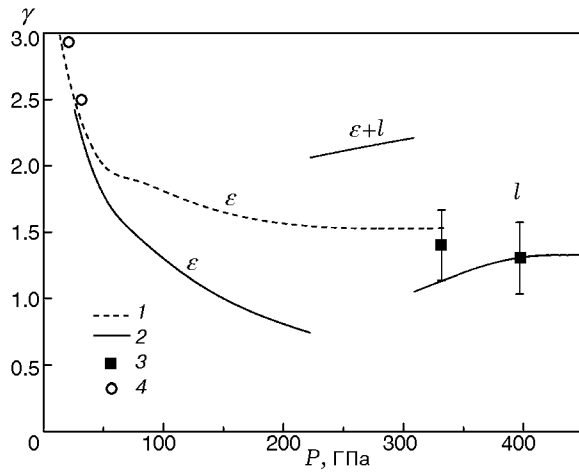


Рис. 15. Зависимость коэффициента Грюнайзена от давления для железа:

расчет: 1 — ϵ -фаза при $T = 298$ К, 2 — вдоль ударной адиабаты, 3 — данные [8], 4 — оценка для ϵ -фазы при $T = 298$ К (см. текст)

$\gamma = \beta C^2 / C_P$ для ϵ -фазы при $T = 298$ К, полученные при использовании для β данных эксперимента [56] (см. рис. 14), для C — эксперимента [54] (линейная интерполяция по двум нижним точкам, изображенным на рис. 13) и приближения $C_P = 3R$. Модельное значение γ для ϵ -фазы при ударном давлении ≈ 200 ГПа, по-видимому, немного занижено, что приводит в конечном итоге к чуть более «мягкому» положению при этом давлении расчетной ударной адиабаты по сравнению с экспериментом (см. рис. 11).

На рис. 16 в P - U -координатах (U — массовая скорость) нанесены экспериментальные

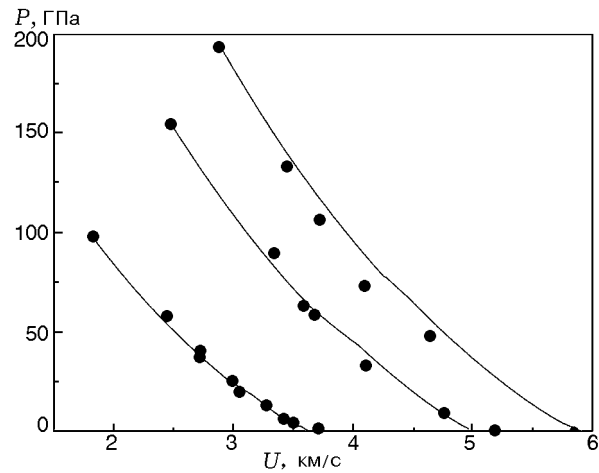


Рис. 16. Зависимость давления от массовой скорости для железа при адиабатической разгрузке из исходного состояния на ударной адиабате с давлениями 98, 154 и 193 ГПа:

значки — эксперимент [52], линии — расчет по УРС данной работы

данные по адиабатической разгрузке Fe из трех состояний с начальным давлением $P_0 \approx 98, 154$ и 193 ГПа, достигаемым ударным сжатием исходной α -фазы ($\rho_0 \approx 7.85$ г/см³). Приведены также модельные изоэнтропы. Значения $U(P)$ вдоль них рассчитаны по соотношению Рима-

на $U(P) = U_0(P_0) + \int_P^{P_0} dP / C\rho$, где $U_0(P_0)$ — начальная массовая скорость. Расчетная температура вдоль этих изоэнтроп приведена на рис. 12. В P - V -координатах на модельных изоэнтропических кривых имеются участки, обращенные выпуклостью вверх, что является

условием образования ударных волн разрежения [58] (при построении расчетных кривых на рис. 16 это явление не учитывалось).

В [59] на основании опытов по ударному сжатию стальных шаров (сталь 40X) оценено ударное давление, после достижения которого материал при разгрузке до $P \approx 0$ переходит в γ -фазу и плавится. Эти значения составляют ≈ 140 и ≈ 200 ГПа соответственно. Согласно настоящему УРС, при ударном сжатии материала плотностью $\rho_0 = 7.85$ г/см³ образующейся при разгрузке смеси фаз $\alpha + \gamma$ отвечает интервал давления $126.6 \div 129.2$ ГПа, смеси $\delta + l$ — интервал $200.1 \div 238.7$ ГПа, что не противоречит [59]. При этом давление плавления при разгрузке выше приводимого в [60] (≈ 140 ГПа).

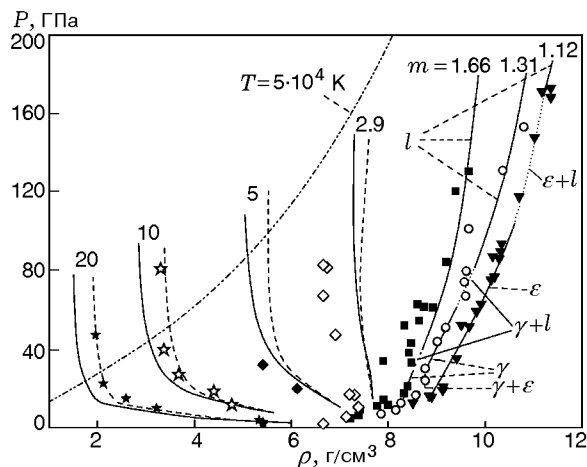


Рис. 17. Зависимость давления от плотности при ударном сжатии пористого образца железа:

$m = 1.12, 1.31, 1.66$ — эксперимент [50], $m = 2.90, 5.0, 10.0, 20.0$ — эксперимент [52]; сплошные (однофазные состояния) и пунктирные (двухфазные состояния) линии — расчет по УРС без учета ионизации, штриховые линии для адиабат при $m = 2.90 \div 20.0$ — расчет с учетом ионизации; линия $T = 5 \cdot 10^4$ К — модельная изотерма

На рис. 17 представлены данные по ударному сжатию пористых образцов исходного α -Fe. Ударные адиабаты определены из уравнения (25), в котором величина ρ_0 заменена на $\rho_{00} = \rho_0/m$ (m — начальная пористость вещества, $\rho_0 = 7.85$ г/см³). На модельных ударных адиабатах с $m = 1.12, 1.31, 1.66$ указаны фазовые состояния вещества. Адиабаты с $m \geq 2.90$ расположены в жидкой фазе. Возможное влияние прочности при упаковке исходного порошкообразного материала при сравнительно низком давлении ($\approx 5 \div 10$ ГПа) в расчетах не учитывалось. Модель в целом согласуется с экспериментом при $m = 1.12 \div 1.66$. В случае $m = 2.90, 5.0$ расчетная плотность завышена, а при $m = 10.0, 20.0$ — занижена по сравнению с экспериментальной (хотя эти отклонения находятся на уровне погрешности определения плотности, составляющей $\approx 5 \div 10$ % для рассматриваемых m). Отклонения при $m = 10.0, 20.0$ уменьшаются при учете в УРС ионизации (см. далее). Расхождения в случае $m = 2.90, 5.0$, возможно, связаны с ошибками эксперимента. Не исключено также, что ответственный за поведение ударных адиабат модельный коэффициент Грюнайзена занижен в реализованной в рассматриваемых опытах области состояний.

Согласно настоящему УРС при $P =$

Таблица 3

Параметры критической точки железа

Источник	T_{cr} , К	P_{cr} , ГПа	ρ_{cr} , г/см ³
[61]	9 340	1.015	2.04
[62]	9 600	0.825	2.03
[63]	9 340	1.043	1.697
[1]	10 300	1.74	1.80
[4–6]	11 990	1.262	2.09
[29]	9 250	0.875	—
[64]	4 762	0.232	1.48
[65]	7 371	0.657	1.625
[66]	7 875	0.356	1.242
[67]	8 787	1.131	2.183
[68]	6 900	0.6	1.4
Настоящая работа	8 763	0.552	1.638

0.101 МПа температура и энтальпия испарения равны 3 130 К и 6.17 кДж/г соответственно (при определении кривой равновесия жидкость — газ используется правило площадей Максвелла). Они близки к экспериментальным значениям 3 110 К и 6.25 кДж/г [26]. В табл. 3 приведены оценочные значения температуры T_{cr} , давления P_{cr} и плотности ρ_{cr} в критической точке фазового перехода жидкость — газ, полученные различными авторами. Эти параметры настоящего УРС (определены из условий $(\partial P/\partial V)_T = (\partial^2 P/\partial V^2)_T = 0$) не противоречат имеющимся оценкам, занимая между ними среднее положение.

На рис. 18 приведена модельная фазовая диаграмма в координатах T – ρ . Расчетная плотность ϵ -фазы на линии плавления $\rho^{m\epsilon}$ при $P = 330$ ГПа (характеризует давление на границе внешнего и внутреннего ядра Земли) равна 13.33 г/см³, что несколько меньше значения 13.5 г/см³ согласно [36]. Как видно из рис. 18, при $T > 5000$ К зависимости $\rho^{m\epsilon}(T)$ и $\rho^{ml}(T)$ сходятся, а затем пересекаются. Это связано с неправомерностью использования при высоких температурах для $C_p^c(T)$ линейного выражения (20), которое приводит к отрицательному значению энтропии плавления $\Delta S^{l\epsilon}$. Для устранения этого недостатка применялся несколько отличный от описанного ранее способ определения УРС ϵ -фазы. При $P^{rep} >$

$P_4^{rep} = 379.323$ ГПа (чему на линии плавления $T^{l\varepsilon}(P)$ соответствуют $P_4 = 301.481$ ГПа, $T_4^{l\varepsilon} = 5144.4$ К) вместо $C_p^\varepsilon(T)$ (20) была задана величина

$$\frac{\Delta S^{l\varepsilon}}{R} = DS0 + \frac{DS1}{P^{rep}/P_4^{rep}} + \frac{DS2}{(P^{rep}/P_4^{rep})^2} + \frac{DS3}{(P^{rep}/P_4^{rep})^3} \quad (26)$$

с константами $DS0 = 0.8$, $DS1 = -0.578106$, $DS2 = 1.855381$, $DS3 = -0.5$ (функции энтропии плавления на нижнем и верхнем участках сшиты по их значениям, первым и вторым производным при $P^{rep} = P_4^{rep}$). Выражение (26) при известных УРС жидкости и линии плавления $T^{l\varepsilon}(P)$ (заданы) позволяет определить энтропию $S^{m\varepsilon}(T)$ ε -фазы вдоль линии плавления, после чего с помощью выражения (11) (при заданных ранее константах S_0^ε , P_*^ε) можно найти $C_p^\varepsilon(T)$ при $T > T_4^{l\varepsilon}$. В остальном способ определения функций $\Phi_C^\varepsilon(P)$, $V_C^\varepsilon(P)$ в (12), (10) при $P^{rep} > P_4^{rep}$ через линию $T^{l\varepsilon}(P)$ аналогичен используемому на нижнем участке (но более сложен, поскольку интегралы по T в (11), (12) при $T > T_4^{l\varepsilon}$ вычисляются численно). Подправленная зависимость $\rho^{m\varepsilon}(T)$ показана на рис. 18.

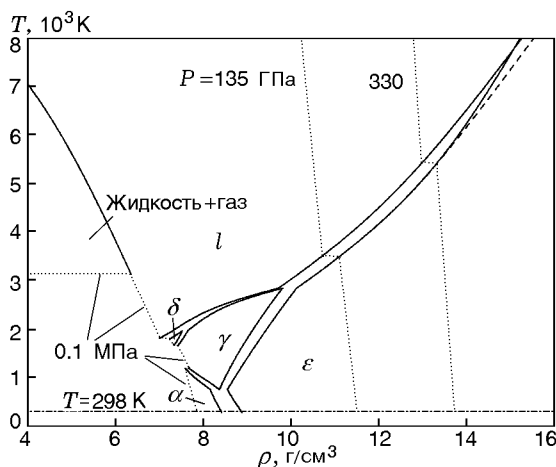


Рис. 18. Модельная фазовая диаграмма железа в координатах температура — плотность: сплошные линии — фазовые границы, пунктирные — изобары при указанном давлении, штриховая линия — подправленная плотность ε -фазы на линии плавления

ОЦЕНКА ВЯЗКОСТИ ЖИДКОГО ЖЕЛЕЗА

На основе модели мВдВ возможна [16, 69] оценка коэффициентов переноса жидкости (газа), в частности коэффициента сдвиговой вязкости η , который определяется выражением

$$\eta = \frac{3.12 \cdot 10^{-6}(WT)^{1/2}V}{V - V_C} \frac{1}{(WV_C)^{2/3}}, \quad (27)$$

где $V_C = V_C(P^{rep})$, W — атомная масса, V , V_C — см³/г, η — Па·с. Расчеты на основе (27) в переменных P , V , T проведены с использованием УРС (1), (2) (конкретизированного выше для Fe). На рис. 19 изображены зависимости $\eta(P)$ на кривой плавления и ряде изотерм. В [70] обобщены результаты экспериментальных (до $T \approx 2100$ К и $P \approx 7$ ГПа) и модельных (в частности, выполненных методом молекулярной динамики для P, T -условий, характерных для ядра Земли) исследований вязкости жидкого Fe. Представленная на рис. 19 модельная вязкость при $T = 2000$ К по порядку величины соответствует эксперименту. Результаты молекулярно-динамических расчетов при $P \approx 135$ ГПа и $T \approx 4000 \div 4300$ К (приблизительные условия на границе внешнего ядра и мантии Земли) дают значения $\eta \approx (0.9 \div 1.2) \cdot 10^{-2}$ Па·с, при $P \approx 330$ ГПа и $T \approx 6000$ К (ориентировочные условия на границе внешнего и внутреннего ядра) они приводят к $\eta \approx (1.3 \div 3.3) \cdot 10^{-2}$ Па·с. Расчет по настоящей модели в целом не противоречит им. При тех же значениях P , T аналогичное согласие с данными молекулярно-динамических расчетов, суммированными в [70], получено и для модельного коэффициента самодиффузии.

УЧЕТ ИОНИЗАЦИИ

При описании свойств Fe при высокой температуре использовалась модель мВдВ [4–6, 16, 17] с учетом термической ионизации (она обобщает (2), (6)). Для свободной энергии \bar{F} смеси ионов (i ; $i = 0$ — атом) и электронов (e) использовались следующие соотношения:

$$\bar{F} = \bar{E}^{rep}(P^{rep}, \{N\}) + \bar{E}^{att}(\bar{V}, T, \{N\}) -$$

$$- kT \sum_{i=0}^{im} N_i \ln \frac{eNT^{5/2} r_i \sigma_i(T)}{N_i P^{rep}}$$

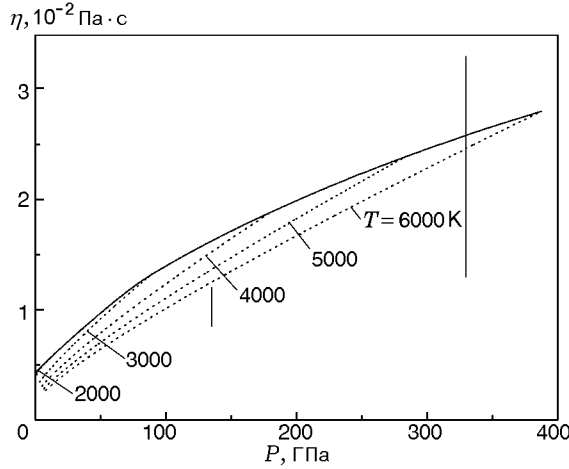


Рис. 19. Модельная зависимость вязкости от давления для жидкого железа вдоль кривой плавления (сплошная линия) и изотерм (пунктирные линии):

вертикальные линии при $P = 135$ и 330 ГПа характеризуют различие результатов расчетов вязкости методом молекулярной динамики (взято из [70])

$$-kTN_e \ln \frac{eNT^{5/2}r_e^2}{N_e P^{rep}}, \quad (28)$$

$$P^{rep} = \frac{NkT}{\bar{V} - \bar{V}_c(P^{rep}, \{N\})}, \quad (29)$$

$$\bar{E}^{rep} = - \int_0^{P^{rep}} P^{rep} \frac{\partial \bar{V}_c(P^{rep}, \{N\})}{\partial P^{rep}} dP^{rep}, \quad (30)$$

$$\bar{E}^{att} = - \int_{\infty}^{\bar{V}} P^{att}(\bar{V}, T, \{N\}) d\bar{V}. \quad (31)$$

Здесь k , e , r , $\sigma(T)$ — аналогичны фигурирующим в (6), $N = \sum_{i=0}^{i_m} N_i + N_e$ — полное число частиц (i_m — число учитываемых ионов), содержащихся в объеме \bar{V} , $\{N\}$ — совокупность значений N_i , N_e , определяющая состав смеси. Интегралы (30), (31) вычисляются при $\{N\} = \text{const}$, (31) — также при $T = \text{const}$. Притяжение P^{att} и коволюм \bar{V}_c — эмпирические функции.

Переменными модели являются P^{rep} , T , $\{N\}$. По ним из (29) можно найти \bar{V} , после чего

из (28) — \bar{F} и другие термодинамические величины (выражение для $P = -(\partial \bar{F} / \partial \bar{V})_{T, \{N\}}$ имеет вид $P = P^{rep} + P^{att}(\bar{V}, T, \{N\})$, аналогичный (1)).

Зависимости P^{att} и \bar{V}_c от $\{N\}$ не учитывались. Полагалось

$$P^{att}(\bar{V}, T, \{N\}) = P^{att}(\bar{V}/M, T) = P^{att}(V, T), \quad (32)$$

$$\bar{V}_c(P^{rep}, \{N\}) = M V_c(P^{rep}), \quad (33)$$

где $M = m \sum_{i=0}^{i_m} N_i$ — масса вещества в объеме \bar{V} , m — масса атома (массой электронов и различием масс ионов пренебрегается), V — удельный (единицы массы) объем, V_c — удельный коволюм.

При термодинамическом равновесии значения N_i , N_e находятся из уравнений $\mu_i = \mu_{i+1} + \mu_e$ для химических потенциалов $\mu_k = (\partial \bar{F} / \partial N_k)_{\bar{V}, T, \{N\}(\neq k)}$ ($k = i, e$; производная вычисляется при постоянном числе частиц всех компонентов, за исключением k -го). Итоговые уравнения имеют вид

$$\frac{N N_i}{N_e N_{i+1}} = J P^{rep} \exp\left(\frac{I_i}{kT}\right) \frac{\bar{\sigma}_i(T)}{T^{5/2} 2\bar{\sigma}_{i+1}(T)}, \quad (34)$$

где $\bar{\sigma}_i(T)$ — статистическая сумма i -го иона с отсчетом энергии относительно его основного уровня, I_i — потенциал ионизации i -го иона, $J = 1/[k^{5/2}(m_e/2\pi\hbar^2)^{3/2}]$. Из (34) и уравнений $\sum_{i=0}^{i_{\max}} N_i = \text{const} = M/m$, $N_e = \sum_{i=1}^{i_{\max}} i N_i$ находят (численно) значения N_i , N_e при заданных параметрах P^{rep} , T .

Уравнения (34) аналогичны уравнениям Саха и переходят в них при $V, T \rightarrow \infty$. При этом модель (28), (29) переходит в УРС смеси идеальных газов ионов и электронов. В случае малых значений T реализуется переход к модели (2), (6).

Функции $P^{att}(V, T)$, $V_c(P^{rep})$ в (32), (33) для Fe определялись по соотношениям (15)–(18). Полагалось $\bar{\sigma}_i(T) = g_{i,0}$ (статвес основного состояния i -го иона). Параметры $g_{i,0}$ и I_i взяты из [19].

Способ построения УРС ε -фазы при учете ионизации жидкости аналогичен описанному ранее, но более сложен из-за необходимости

определять $\bar{\Phi}^l(P, T)$ численно на линии плавления. Из-за учета в модели (28), (29) только термической ионизации ее степень N_e/N_0 на линии плавления при $P \leq 10$ ТПа мала ($\leq 2\%$). В этом диапазоне давления ее можно не учитывать и использовать вышеизложенную схему определения УРС ε -фазы.

На рис. 17 показаны результаты расчета ударных адиабат пористого Fe на основе модели (28), (29). Они лучше соответствуют экспериментальным данным при $m = 10, 20$, чем расчет по модели без ионизации.

На рис. 20 приведены данные опытов по ударному сжатию сплошных и пористых образцов Fe при $P \leq 6000$ ГПа и их описание рассматриваемым УРС. Для калибровки модельных параметров эксперименты с пористыми образцами не привлекали (как и ранее для модели без учета ионизации). На рис. 20 показаны также кривые холодного сжатия, построенные согласно УРС из работ [1, 12] и настоящей работы (для жидкости и твердой фазы). Последние занимают промежуточное положение между результатами [1] и [12]. Аналогичным свойством обладает нулевая изотерма УРС [2].

На рис. 21 сопоставлены ударные адиабаты

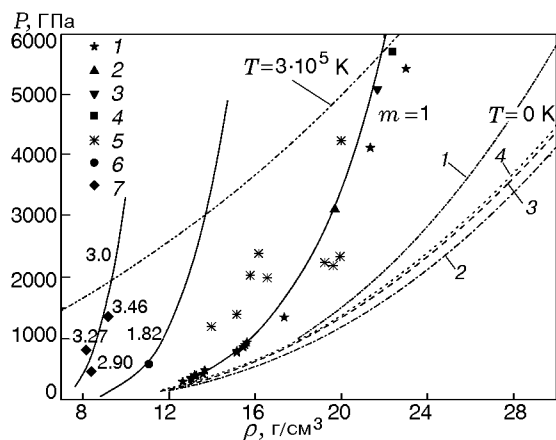


Рис. 20. Зависимость давления от плотности при ударном сжатии сплошного и пористого железа и при нулевой температуре:

эксперимент по ударному сжатию, сплошные образцы: 1 — [52], 2 — [71], 3 — [72], 4 — [73], 5 — [74], пористые образцы: 6, 7 — [52], значения пористости см. на рисунке; сплошные линии — расчет адиабаты по УРС настоящей работы; модельные кривые сжатия при $T = 0$ К: 1 — [1], 2 — [12], 3 (твердая фаза), 4 (жидкая фаза) — УРС настоящей работы; линия $T = 3 \cdot 10^5$ К — модельная изотерма

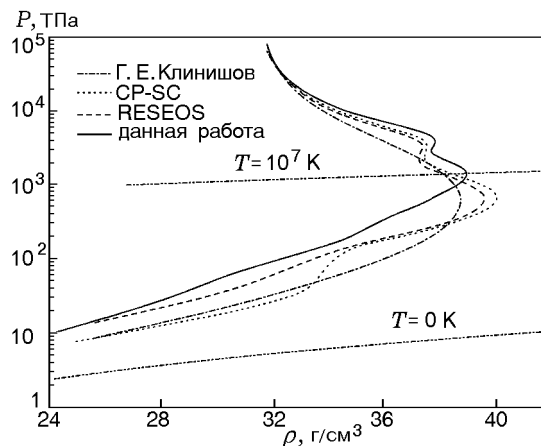


Рис. 21. Зависимость давления от плотности при ударном сжатии сплошного железа по УРС Г. Е. Клинишова, CP-SC, RESEOS и настоящей работы:

линии $T = 0$ К и $T = 10^7$ К — модельные изотермы УРС настоящей работы

ты сплошного Fe, рассчитанные по УРС Г. Е. Клинишова, CP-SC, RESEOS (результаты взяты из [75]) и настоящей работы. Последняя кривая наиболее близка к ударной зависимости RESEOS (максимальное различие между ними по плотности $\approx 5\%$).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе построено полуэмпирическое УРС железа, отражающее, наряду со свойствами жидкости и газа, также свойства четырех твердых фаз. Выполнено сопоставление результатов модельных расчетов с совокупностью имеющихся данных опытов в области от нормальных условий до давления ≈ 10 ТПа и температуры $\approx 10^5$ К. Описание экспериментальных результатов, как правило (за отдельными, оговоренными в тексте исключениями), находится на уровне точности измерений или расхождений между данными различных авторов (для однотипных опытов). При малой плотности модельное УРС переходит в УРС идеального газа по Саха. Совместно с удовлетворительным качеством модели при плотности, близкой к нормальной (в частности, при описании высокотемпературного эксперимента с пористыми образцами без специальной нормировки), это позволяет надеяться на применимость УРС и в промежуточной между ними, с умеренной плотностью, области параметров. Расчетные параметры критической точки лежат в

области значений, полученных другими способами. Оценки вязкости жидкого железа не противоречат эксперименту и расчетным данным по методу молекулярной динамики при высоких давлении и температуре.

Автор благодарен В. В. Хрусталеву за предоставление результатов расчетов по теоретическим моделям.

ЛИТЕРАТУРА

- Сапожников А. Т., Першина А. В. Полуэмпирическое уравнение состояния металлов в широком диапазоне плотностей и температур // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методы и программы численного решения задач математической физики. — 1979. — Вып. 4 (6). — С. 47–56.
- Альтшулер Л. В., Брусникин С. Е. Уравнение состояния сжатых и нагретых металлов // Теплофизика высоких температур. — 1989. — Т. 27, № 1. — С. 42–51.
- Guillermot A. F., Gustafson P. An assessment of the thermodynamic properties and the (p, T) phase diagram of iron // High Temp. — High Press. — 1985. — V. 16. — P. 591–610.
- Медведев А. Б. Модель уравнения состояния с учетом испарения, ионизации и плавления // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. — 1992. — Вып. 1. — С. 12–19.
- Kopyshov V. P., Medvedev A. B. Thermodynamic model of dense and heated matter // Soviet Technol. Rev. Sect. B. Thermal Phys. Rev. — 1993. — V. 5. — P. 37–93.
- Копышев В. П., Медведев А. Б. Термодинамическая модель сжимаемого коволюма. — Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 1995. — С. 58–120.
- Kerley G. I. Multiphase equation of state for iron // Sandia National Laboratories Report SAND93-0027. — 1993.
- Anderson W. W., Ahrens T. J. An equation of state for liquid iron and implications for the Earth's core // J. Geophys. Res. — 1994. — V. 99, N B3. — P. 4273–4284.
- Chen G. Q., Ahrens T. J. High-pressure melting of iron: new experiments and calculation // Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. A. — 1996. — V. 354. — P. 1251–1263.
- Saxena S. K., Dubrovinsky L. S. Thermodynamics of iron phases at high pressures and temperatures // Properties of Earth and Planetary Materials / M. H. Manghnani, T. Yagi (Eds). — AGU, Washington, D. C., 1998. — P. 271–279.
- Dremov V. V., Kutepov A. L., Petrovtsev A. V., Sapozhnikov A. T. Equation of state and phase diagram of iron // Shock Compression of Condensed Matter — 2001. — AIP CP 620. — 2002. — P. 87–90.
- Ломоносов И. В. Фазовые диаграммы и термодинамические свойства металлов при высоких давлениях и температурах: автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук. — М., 1999.
- Komabayashi T., Fei Y. W. Internally consistent thermodynamic database for iron to the Earth's core conditions // J. Geophys. Res. — 2010. — V. 115. — B03202.
- Grover R. Liquid metal equation of state based on scaling // J. Chem. Phys. — 1971. — V. 55, N 7. — P. 3435–3441.
- Brichikov S. A., Dremov V. V., Kovalenko G. V., Kozlov E. A., Petrovtsev A. V., Varfolomeev D. A., Bragov A. M., Lomunov A. K., Dobromyslov A. V., Taluts N. I., Juanicotena A., Gatulle M., Voltz C. Phase transition, high-rate straining and fracture of iron under spherical explosive loading // Shock Compression of Condensed Matter — 2007. — AIP CP 955. — 2007. — P. 251–254.
- Медведев А. Б. Уравнение состояния и коэффициенты переноса аргона на основе модифицированной модели Ван-дер-Ваальса до давлений 100 ГПа // Физика горения и взрыва. — 2010. — Т. 46, № 4. — С. 116–126.
- Медведев А. Б., Трунин Р. Ф. Ударное сжатие пористых металлов и силикатов // Успехи физ. наук. — 2012. — Т. 182, вып. 8. — С. 829–844.
- Копышев В. П. Термодинамическая модель плотной жидкости // ПМТФ. — 1971. — № 1. — С. 122–128.
- Moore C. E. Ionization potentials and ionization limits derived from optical spectra. — Washington, D.C.: US Gov't Printing Office, 1970. — (NSRDS-NBS, V. 34).
- Dever D. J. Temperature Dependence of the Elastic Constants in α -Iron Single Crystals: Relationship to Spin Order and Diffusion Anomalies // J. Appl. Phys. — 1972. — V. 43, N 8. — P. 3293–3301.
- Adams J. J., Agosta D. S., Leisure R. G., Ledbetter H. Elastic constants of monocrystal iron from 3 to 500 K // J. Appl. Phys. — 2006. — V. 100. — 113530.
- Zaretsky E. B. Shock response of iron between 143 and 1275 K // J. Appl. Phys. — 2009. — V. 106. — 023510.
- Tsu Y., Takano K., Shiraishi Y. The velocities of ultrasound in molten iron, cobalt and nickel (in Japanese) // Bull. Res. Inst. Miner. Dressing Metall. Tohoku Univ. — 1985. — V. 41. — P. 1–8.
- Nasch P. M., Manghnani M. H., Secco R. A. Sound velocity measurements in liquid iron by ultrasonic interferometry // J. Geophys. Res. — 1994. — V. 99, N B3. — P. 4285–4291.
- Hixson R. S., Winkler M. A., Hodgdon M. L. Sound speed and thermophysical properties of iron and nickel // Phys. Rev. B. — 1990. — V. 42. — P. 6485–6491.

26. **Desai P. D.** Thermodynamic properties of iron and silicon // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* — 1986. — V. 15, N 3. — P. 967–983.
27. **Drotning W. D.** Thermal expansion of iron, cobalt, nickel and copper // *High Temp. — High Press.* — 1981. — V. 13. — P. 441–459.
28. **Korobenko V. N., Agranat M. B., Ashitkov S. I., Savvatimskiy A. I.** Zirconium and iron densities in a wide range of liquid states // *Intern. J. Thermophys.* — 2002. — V. 23, N 1. — P. 307–318.
29. **Beutl M., Pottlacher G., Jager H.** Thermophysical properties of liquid iron // *Intern. J. Thermophys.* — 1994. — V. 15, N 6. — P. 1323–1331.
30. **Тонков Е. Ю.** Фазовые диаграммы элементов при высоком давлении. — М.: Наука, 1979.
31. **Bancroft D., Peterson E. L., Minshall S.** Polymorphism of iron at high pressure // *J. Appl. Phys.* — 1956. — V. 27, N 3. — P. 291–298.
32. **Williams Q., Jeanloz R., Bass J., Svendsen B., Ahrens T. J.** The melting curve of iron to 250 Gigapascals: a constraint on the temperature at Earth's center // *Science.* — 1987. — V. 236. — P. 181–182.
33. **Boehler R.** Temperatures in the Earth's core from melting-point measurements of iron at high static pressures // *Nature.* — 1993. — V. 363. — P. 534–536.
34. **Shen G., Mao H. K., Hemley R. J., Duffy T. S., Rivers M. L.** Melting and crystal structure of iron at high pressures and temperatures // *Geophys. Res. Lett.* — 1998. — V. 25, N 3. — P. 373–376.
35. **Boehler R., Santamaria-Perez D., Errandonea D., Mezouar M.** Melting, density, and anisotropy of iron at core conditions: new X-ray measurements to 150 GPa // *J. Phys.: Conf. Ser.* — 2008. — V. 121. — 022018. — (Joint 21st AIRAPT and 45th EHPRG Int. Conf. on High Pressure Science and Technology).
36. **Murphy C. A., Jackson J. M., Sturhahn W., Chen B.** Melting and thermal pressure of hcp-Fe from the phonon density of states // *Phys. Earth Planet. Inter.* — 2011. — V. 188. — P. 114–120.
37. **Ma Y. Z., Somayazulu M., Shen G., Mao H. K., Shu J. F., Hemley R. J.** In situ X-ray diffraction studies of iron to Earth-core conditions // *Phys. Earth Planet. Inter.* — 2004. — V. 143. — P. 455–467.
38. **Jackson J. M., Sturhahn W., Lerche M., Zhao J., Toellner T. S., Alp E. E., Sinoikein S. V., Bass J. D., Murphy C. A., Wicks J. K.** Melting of compressed iron by monitoring atomic dynamics // *Earth and Planet. Sci. Lett.* — 2013. — V. 362. — P. 143–150.
39. **Yoo C. S., Holmes N. C., Ross M.** Shock temperature and melting of iron at Earth core conditions // *Phys. Rev. Lett.* — 1993. — V. 70, N 25. — P. 3931–3934.
40. **Tan H., Dai C. D., Zhang L. Y., Xu C. H.** Method to determine the melting temperatures of metals under megabar shock pressures // *Appl. Phys. Lett.* — 2005. — V. 87. — P. 221905.
41. **Копышев В. П.** О термодинамике ядер одноатомного вещества // *Численные методы механики сплошных сред: сб. науч. тр. — Новосибирск, 1977. — Т. 8, № 6. — С. 54–67.*
42. **Калиткин Н. Н.** Модель атома Томаса — Ферми с квантовыми и обменными поправками // *Журн. эксперим. и теорет. физ.* — 1960. — Т. 38, вып. 5. — С. 1534–1540.
43. **Wilburn D. R., Bassett W. A.** Hydrostatic compression of iron and related compounds: an overview // *Amer. Mineral.* — 1978. — V. 63. — P. 591–596.
44. **Uchida T., Wang Y., Rivers M. L., Sutton S. R.** Stability field and thermal equation of state of ϵ -iron determined by synchrotron X-ray diffraction in a multianvil apparatus // *J. Geophys. Res.* — 2001. — V. 106, N B10. — P. 21,799–21,810.
45. **Jephcoat A. P., Mao H. K., Bell P. M.** Static compression of iron to 78 GPa with rare gas solids as pressure-transmitting media // *J. Geophys. Res.* — 1986. — V. 91. — P. 4677–4684.
46. **Mao H. K., Wu Y., Chen L. C., Shu J. F., Jephcoat A. P.** Static compression of iron to 300 GPa and Fe_{0.8}Ni_{0.2} alloy to 260 GPa: Implications for composition of the core // *J. Geophys. Res.* — 1990. — V. 95. — P. 21,737–21,742.
47. **Dewaele A., Loubeyre P., Ocelli F., Mezouar M., Dorogokupets P. I., Torrent M.** Quasihydrostatic equation of state of iron above 2 Mbar // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — V. 97. — 215504.
48. **Chen G. Q., Ahrens T. J.** High pressure and high temperature equation-of-state of gamma and liquid iron // *High-Pressure Materials Research.* — Warrendale, PA, 1998. — P. 41–61. — (Mat. Res. Soc. Symp. Proc.; V. 499).
49. **Ahrens T. J., Holland K. G., Chen G. Q.** Phase diagram of iron, revised-core temperatures // *Geophys. Res. Lett.* — 2002. — V. 29, N 7. — P. 54.
50. **LASL Shock Hugoniot Data / S. P. Marsh (Ed.).** — Berkeley; Los Angeles; London: Univ. California Press, 1980.
51. **Brown J. M., Fritz J. N., Hixson R. S.** Hugoniot data for iron // *J. Appl. Phys.* — 2000. — V. 88, N 9. — P. 5496–5498.
52. **Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ: справочник / под ред. Р. Ф. Трунина.** — Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2006.
53. **Nguyen J. H., Holmes N. C.** Melting of iron at the physical conditions of the Earth's core // *Nature.* — 2004. — V. 427. — P. 339–342.

54. **Mao H. K., Shu J., Shen J., Hemley R. J., Li B., Singh A. K.** Elasticity and rheology of iron above 220 GPa and the nature of the Earth's inner core // *Nature*. — 1998. — V. 396. — P. 741–743.
55. **Brown J. M., McQueen R. G.** Phase transitions, Grüneisen parameter, and elasticity for shocked iron between 77 GPa and 400 GPa // *J. Geophys. Res. Solid Earth Planets*. — 1986. — V. 91. — P. 7485–7494.
56. **Funamori N., Yagi T., Uchida T.** High-pressure and high-temperature in situ X-ray diffraction study of iron above 30 GPa using MA8-type apparatus // *Geophys. Res. Lett.* — 1996. — V. 23. — P. 953–956.
57. **Dubrovinsky L. S., Saxena S. K., Tutti F., Rekh S., LeBehan T.** In situ X-ray study of thermal expansion and phase transition of iron at multimegabar pressure // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — V. 84. — P. 1720–1723.
58. **Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.** Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — М.: Физматгиз, 1963.
59. **Зельдович В. И., Литвинов Б. В., Пурьгин Н. П., Ринкевич О. С., Бузанов В. И., Хейфец А. Э., Хомская И. В.** Квазисферическое взрывное нагружение стали с давлением до 200 ГПа // *Докл. АН.* — 1995. — Т. 343, № 5. — С. 621–624.
60. **Фунтиков А. И., Осипов Р. С., Цыганов В. А.** Изоэнтропы разгрузки железа и аустенитной стали из состояния ударного сжатия при давлении 150 ГПа // *Теплофизика высоких температур.* — 1999. — Т. 37, № 6. — С. 887–894.
61. **Young D., Alder B.** Critical point of metals from van der Waals model // *Phys. Rev. A.* — 1971. — V. 3, N 1. — P. 364–371.
62. **Фортов В. Е., Дремин А. Н., Леонтьев А. А.** Оценка параметров критической точки // *Теплофизика высоких температур.* — 1975. — Т. 13, № 5. — С. 1072–1080.
63. **Hornung K.** Liquid metal coexistence properties from corresponding states and third law // *J. Appl. Phys.* — 1975. — V. 46, N 6. — P. 2548–2558.
64. **Hess H., Schnidlenbach H.** On the estimation of critical data of transition metals // *Z. Metallkd.* — 1996. — V. 87, N 12. — P. 979–984.
65. **Levashov P. R., Fortov V. E., Khishchenko K. K., Lomonosov I. V.** Equation of state for liquid metals // *Shock Compression of Condensed Matter* — 1999. — AIP CP 505. — 2000. — P. 89–91.
66. **Левашов П. Р.** Уравнение состояния жидких металлов как системы мягких сфер. — М., 2000. — (Препр. / РАН. ОИВТ № 1-446).
67. **Lomonosov I. V., Fortov V. E., Khishchenko K. K., Levashov P. R.** Phase diagrams and thermodynamic properties of metals at high pressures, high temperatures // *Shock Compression of Condensed Matter* — 2001. — AIP CP 620. — 2002. — P. 111–114.
68. **Maw J. R.** A relatively simple analytical equation of state for liquid metals // *Shock Compression of Condensed Matter* — 2011. — AIP CP 1426. — 2012. — P. 779–782.
69. **Медведев А. Б.** Коэффициенты переноса в модифицированной модели Ван-дер-Ваальса // *Теплофизика высоких температур.* — 1995. — Т. 33, № 2. — С. 227–235.
70. **Минеев В. Н., Фунтиков А. И.** Об измерении вязкости расплавов металлов при высоких давлениях и расчетах вязкости применительно к ядру Земли // *Успехи физ. наук.* — 2004. — Т. 174, № 7. — С. 727–742.
71. **Альтшулер Л. В., Моисеев Б. Н., Попов Л. В., Симаков Г. В., Трунин Р. Ф.** Сравнительная сжимаемость железа и свинца при давлениях 31–34 Мбар // *Журн. эксперим. и теорет. физ.* — 1968. — Т. 54, вып. 3. — С. 785–789.
72. **Трунин Р. Ф., Подурец М. А., Симаков Г. В., Попов Л. В., Моисеев Б. Н.** Экспериментальная проверка модели Томаса — Ферми для металлов при высоких давлениях // *Журн. эксперим. и теорет. физ.* — 1972. — Т. 62, вып. 3. — С. 1043–1048.
73. **Ragan C. E. III.** Shock-wave experiments at threefold compression // *Phys. Rev. A.* — 1984. — V. 29, N 3. — P. 1391–1402.
74. **Batani D., Morelli A., Tomasini M., Benuzzi-Mounaix A., Philippe F., Koenig M., Marchet B., Masclet I., Rabec M., Reverdin Ch., Cauble R., Celliers P., Collins G., Da Silva L., Hall T., Moret M., Sacchi B., Baclet P., Cathala B.** Equation of state data for iron at pressures beyond 10 Mbar // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — V. 88, N 23. — 235502.
75. **Лобода П. А., Овечкин А. А., Шадрин А. А.** Расчет уравнений состояния и ударных адиабат металлов по теоретическим моделям плотного ионизованного вещества с учетом оболочечных эффектов // *Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны / под ред. А. Л. Михайлова.* — Междунар. конф. «XIII Харитоновские тематические научные чтения», 14–18 марта 2011 г., Саров. — С. 297–308.

*Поступила в редакцию 18/VII 2013 г.,
в окончательном варианте — 21/XI 2013 г.*