

УДК 536.71

МОДЕЛЬ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ МЕТАЛЛОВ С ЭФФЕКТИВНЫМ УЧЕТОМ ИОНИЗАЦИИ. УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ Ta, W, Al, Be

Д. Г. Гордеев, Л. Ф. Гударенко, А. А. Каякин, В. Г. Куделькин

РФЯЦ, ВНИИ экспериментальной физики, 607188 Саров, gug@vniief.ru

Представлена модель широкодиапазонного полуэмпирического уравнения состояния металлов. Теплоемкость, коэффициенты Грюнайзена ионов и электронов являются функциями плотности и температуры. При низких температурах теплоемкость меняется в соответствии с теорией Дебая. Учитывается снятие вырождения электронного газа при повышении температуры. Эффективно учитывается влияние процессов ионизации на термодинамические функции. Уравнение состояния позволяет рассчитывать состояния в двухфазной области жидкость — пар. С использованием данной модели разработаны уравнения состояния W, Ta, Be, Al. Для своей области применимости уравнение состояния содержит относительно небольшое число свободных параметров, большинство из которых имеют физический смысл. Сравнение расчетов различных изолиний по уравнениям состояния с экспериментальными данными и с расчетами по другим моделям показало, что уравнения состояния W, Ta, Be, Al описывают большинство экспериментальных данных для этих веществ. В области сверхвысоких давлений и температур расчеты по уравнениям состояния удовлетворительно согласуются с расчетами по модели Томаса — Ферми с поправками.

Ключевые слова: уравнение состояния, тантал, вольфрам, алюминий, бериллий.

ВВЕДЕНИЕ

Современные теоретические модели уравнения состояния (УРС) конденсированных веществ позволяют проводить вычисление их термодинамических характеристик лишь на отдельных участках фазовой плоскости. Общепринятый подход при построении УРС, ориентированных на использование в прикладных расчетах, состоит в разработке полуэмпирических моделей. В этих моделях вид функциональных зависимостей устанавливается с привлечением физических представлений и допущений о поведении вещества, а совокупность экспериментальных и расчетных данных используется для определения конкретных значений свободных параметров в этих зависимостях. В полуэмпирических моделях неточность правдоподобных физических представлений компенсируется введением в модель свободных параметров. Основная цель данной работы — создание полуэмпирической модели, позволяющей с приемлемой точностью описать термодинамические свойства металлов как в области, доступной для экспериментальных

исследований, так и в области состояний, описываемой теоретическими моделями УРС.

Из большого числа публикаций, содержащих описание полуэмпирических уравнений состояния, нами были выделены и более детально проанализированы модели широкодиапазонных УРС [1–11]. Из них наиболее известны уравнения, представленные в работах [1–3]. Данного вида УРС позволяют хорошо описывать экспериментально исследованные области, включая и изменение термодинамических функций при фазовых переходах (см., например, [3]). Однако «область применимости (модели [1–3]) составляет до 100-кратного сжатия для вещества при $T = 0$ К, а при ненулевых температурах ограничена давлениями ударного сжатия до $200 \div 300$ Мбар и, сверху, изоэнтропой разгрузки от указанных давлений» [3]. Из этого следует, что модель УРС [1–3] не ориентирована на описание области состояний, где применимы теоретические модели УРС. В ряде работ (см., например, [4–6, 9–11]) представлены описания моделей широкодиапазонных УРС, в которых учет вклада электронов в давление и энергию осуществляется с использованием аппроксимаций модели Томаса — Ферми [12] или ее модификаций. Извест-

на также (см., например, [7, 8]) модель широкодиапазонного УРС (термодинамическая модель сжимаемого коволюма), представляющая собой модификацию модели Ван-дер-Ваальса, которая расширяет применимость модели в область повышенных плотностей.

Модель данной работы имеет следующие основные отличия от проанализированных нами моделей:

— область применения шире, чем у модели [1–3]: в ней нет ограничений на описание состояний при давлениях, больших $200 \div 300$ Мбар; менее точна, чем модель [1–3], в области, где существенно влияние фазового перехода твердое тело — жидкость;

— в форме модели не заложена аппроксимация ни модели Томаса — Ферми [12], как в моделях [4–6, 9–11], ни какой-либо другой теоретической модели УРС. Форма электронных составляющих позволяет аппроксимировать расчеты практически по любой теоретической статистической модели УРС;

— в отличие от полуэмпирической модели [7, 8] (модифицированной модели Ван-дер-Ваальса), данная модель получена в результате последовательного развития принципиально другой модели [13], в которой внутренняя энергия и давление представлены в виде сумм трех составляющих, описывающих упругие свойства холодного металла, тепловой вклад ядер и тепловой вклад электронов. Формы моделей разные, при этом заявленные области применимости близки. Модель [7, 8] более точна в области, где существенно влияние фазового перехода твердое тело — жидкость. По-видимому, в представляемой нами модели форма электронных составляющих позволяет точнее, чем модель [7, 8], аппроксимировать расчеты по теоретическим статистическим моделям УРС.

Данная модель УРС реализована в виде программы для расчета термодинамических функций по аналитическим зависимостям с использованием хорошо сходящихся итерационных процессов. Время вычисления термодинамических функций сопоставимо с временем их вычисления в табличных УРС.

ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Модель получена в результате модификации модели УРС, описанной в [14]. Были усовершенствованы алгоритмы расчета вклада электронов в давление и энергию — введены соотношения, эффективно учитывающие

влияние ионизации на поведение термодинамических функций. Усложнена зависимость для представления коэффициента Грюнайзена ядер.

В данной модели, как и во многих современных полуэмпирических моделях УРС, свободная энергия представлена в виде трех слагаемых:

$$F(\rho, T) = E_x(\rho) + F_p(\rho, T) + F_e(\rho, T), \quad (1)$$

где ρ — плотность, $E_x(\rho)$ — потенциальная («холодная») составляющая энергии, $F_p(\rho, T)$ — тепловая («решеточная») составляющая свободной энергии, связанная с тепловым движением атомов (ядер), $F_e(\rho, T)$ — тепловая составляющая, учитывающая движение термически возбужденных электронов.

В приведенных ниже выражениях для каждой составляющей из (1) вместо плотности ρ используется безразмерный параметр $\delta = \rho/\rho_0$, характеризующий отношение текущей плотности к плотности при нормальных условиях.

Потенциальные составляющие давления и энергии

В зависимостях $P_x(\delta)$, используемых в данной модели, выделено три участка: $0 \leq \delta < 1$; $1 \leq \delta \leq \delta_c$; $\delta > \delta_c$. Здесь δ_c — относительное сжатие в точке перехода от зависимости $P_x(\delta)$, используемой в диапазоне $1 \leq \delta \leq \delta_c$, к зависимости $P_x(\delta)$, рассчитанной в области сверхвысоких давлений и плотностей по выбранной теоретической модели УРС.

В диапазоне $0 \leq \delta < 1$ потенциальная составляющая энергии представлена аналитической зависимостью

$$E_x(\delta) = \frac{1}{\rho_0} \left[a \frac{\delta^n}{n} + b \frac{\delta^m}{m} + c \frac{\delta^l}{l} \right] - \frac{1}{\rho_0} \left[\frac{a}{n} + \frac{b}{m} + \frac{c}{l} \right] + E_{x0}. \quad (2)$$

Потребуем, чтобы для зависимостей $P_x(\delta)$ и $E_x(\delta)$ в диапазоне $0 \leq \delta \leq 1$ выполнялись следующие условия:

$$P_x|_{\delta=1} = P_{x0}, \quad P_x|_{\delta=0} = 0, \quad P_x|_{\delta < 1} < 0, \\ E_x|_{\delta=1} = E_{x0}, \quad E_x|_{\delta=0} = Q_{св}, \quad (3)$$

$$\left. \frac{dP_x}{d\delta} \right|_{\delta=1} = P'_{x0}, \quad \left. \frac{d^2 P_x}{d\delta^2} \right|_{\delta=1} = P''_{x0}.$$

Последние два условия означают сшивку потенциального давления до второй производной с расчетами по формулам, описывающим потенциальные составляющие на участке $1 \leq \delta \leq \delta_c$; P'_{x0} , P''_{x0} — соответственно первая и вторая производные, вычисленные по этим формулам в точке $\delta = 1$; $Q_{св}$ — энергия связи вещества.

При $\delta = 1$ давление в веществе нормируется на нормальные условия $\rho = \rho_0$, $P_0 = 10^{-4}$ ГПа, $T = 293$ К. Потенциальное давление в точке $\delta = 1$ определяется разностью $P_0 - P_T$ ($\delta = 1$, $T = 293$ К), где $P_T = P_p + P_e$. Значение $P_x = 0$ достигается в точке $\rho = \rho_{0k}$.

Константа E_{x0} в (2) выбирается исходя из условия $E_x(\rho = \rho_{0k}) = 0$.

Из условий (3) можно получить формулы для четырех свободных параметров выражения (2). Оставшиеся два параметра могут быть определены из условия наилучшего описания критической точки двухфазной области жидкость — пар, точки кипения и данных, полученных в ударно-волновых экспериментах при исследовании изоэнтроп расширения и ударных адиабат сильнопористых образцов вещества.

В диапазоне $1 \leq \delta \leq \delta_c$ потенциальные составляющие на стадии подбора параметров рассчитываются в табличном виде по заданной ударной адиабате сплошного вещества и тепловым составляющим (подробнее см., например, [14]). В УРС при расчете $P_x(\delta)$, $E_x(\delta)$ используются не таблицы, полученные при подборе параметров, а результаты их аппроксимации интерполяционными кубическими сплайнами класса C^2 [15].

При $\delta > \delta_c$ потенциальные составляющие давления и энергии рассчитываются по алгоритму, обеспечивающему переход к зависимости, рассчитанной по теоретической модели УРС. Для обеспечения непрерывности функции и ее производной в точке $\delta = \delta_c$ используется алгоритм, аналогичный реализованному в программе PANDA [16]. По данному алгоритму при $\delta > \delta_c$ потенциальная энергия вычисляется по формуле

$$E_x(\delta) = (E_{\text{ТФП}}(\delta) - E_{\text{ТФП}}(\delta_c))Y(\delta) + \Delta E_x, \quad (4)$$

где $E_{\text{ТФП}}(\delta)$ — энергия, рассчитываемая по модели Томаса — Ферми с поправками (ТФП) [17], формула (4) не изменится, если вместо модели ТФП использовать другую модель для расчета $E_x(\delta)$ в области больших плотностей и давлений; $Y(\delta) = 1 + (b_1 + b_2\delta^{-\alpha} + b_3\delta^{-2\alpha})\delta^{-1}$ —

интерполяционная функция. Параметр α определяет скорость приближения значений потенциального давления, найденного по интерполяционной зависимости (4), к значениям, рассчитанным по теоретической модели в области больших плотностей и давлений (в нашем случае к расчетам по модели ТФП). Константы ΔE_x , b_1 , b_2 и b_3 определяются из условий непрерывности функций и их производных в точке δ_c :

$$\begin{aligned} E_x(\delta_c) &= E_s(\delta_c), & P_x(\delta_c) &= P_s(\delta_c), \\ P'_x(\delta_c) &= P'_s(\delta_c), & P''_x(\delta_c) &= P''_s(\delta_c). \end{aligned}$$

Индексом s обозначены значения давления и энергии, рассчитанные (по сплайнам) на участке $1 \leq \delta \leq \delta_c$. Очевидно, что в (4) $\Delta E_x = E_s(\delta_c)$.

Тепловой вклад ядер

В данной модели вид зависимости, определяющей вклад ядер в свободную энергию, выбран таким же, как и в УРС [14]. Как показала практика использования такой зависимости при разработке УРС нескольких металлов, она обладает хорошими интерполяционными свойствами и позволяет без учета изменения термодинамических функций при плавлении и полиморфных фазовых переходах непротиворечиво описывать имеющиеся экспериментальные данные.

Используемая нами зависимость имеет вид

$$F_p(\delta, T) = C_{V0}^p T \left\{ \ln \left[1 - \exp \left(- \frac{\theta(\delta, T)}{T} \right) \right] - \frac{1}{3} D \left(\frac{\theta(\delta, T)}{T} \right) \right\}, \quad (5)$$

где C_{V0}^p — «решеточная» изохорная теплоемкость, $\theta(\delta, T)$ — температура Дебая, $D(x) = \frac{3}{x^3} \int_0^x \frac{t^3 dt}{e^t - 1}$ — функция Дебая. Для вычисления функции Дебая применяется аппроксимация, представленная в работе [18]. Для температуры Дебая выбрано выражение

$$\theta(\delta, T) = \theta_D(\delta) \sqrt{1 + T/\psi_p(\delta)}, \quad \theta_D(\delta) = \theta(\delta, 0).$$

Связь $\theta_0(\delta)$ с коэффициентом Грюнайзена определяется следующим образом:

$$\theta_D(\delta) = \theta_0 \exp\left(\int_1^\delta \frac{\Gamma_0(x)}{x} dx\right), \quad \theta_0 = \theta_D(1),$$

где $\Gamma_0(\delta)$ — функция, характеризующая зависимость коэффициента Грюнайзена ядер (решетки) «холодного» вещества (при $T \cong 0$) от плотности.

Функция $\psi_p(\delta)$ приближенно характеризует высоту потенциального барьера, который нужно преодолеть атому, чтобы уйти из узла решетки, и зависит только от плотности (расстояния между атомами). Функции $\psi_p(\delta)$ и $\Gamma_0(\delta)$ связаны уравнением

$$\psi_p(\delta) = \psi_0 \delta^{-\gamma_{i.g}} \exp\left(2 \int_1^\delta \frac{\Gamma_0(\tau)}{\tau} d\tau\right),$$

$$\psi_0 = \psi_p(1),$$

$\gamma_{i.g}$ определяет асимптотическое значение коэффициента Грюнайзена для идеального газа при $T \rightarrow \infty$. Выражение (5) обеспечивает выполнение предельных переходов для изохорической теплоемкости:

$$\left(\frac{\partial E_p}{\partial T}\right)_\delta \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad \frac{T}{\psi_p(\delta)} \rightarrow 0,$$

$$\left(\frac{\partial E_p}{\partial T}\right)_\delta \rightarrow \frac{C_{V0}^p}{2} \quad \text{при} \quad \frac{T}{\psi_p(\delta)} \rightarrow \infty.$$

Таким образом, если задать согласно закону Дюлонга — Пти $C_{V0}^p = \frac{3R}{A}$, то при $T \rightarrow \infty$ будем иметь $\left(\frac{\partial E_p}{\partial T}\right)_\delta = \frac{3R}{2A}$, т. е. выполняется асимптотический переход к теплоемкости идеального одноатомного газа.

Для описания зависимости $\Gamma_0(\delta)$ выделено два участка: $0 \leq \delta \leq \delta_p$ и $\delta > \delta_p$ ($\delta_p > 1$). В диапазоне $0 \leq \delta \leq \delta_p$ расчет проводится по формуле

$$\Gamma_0(\delta) = A_p + \frac{\gamma_{1p} - A_p}{1 + (\delta/\delta_{mp})^{a_p}} + \frac{\gamma_{2p} - A_p}{1 + (\delta/\delta_{np})^{-b_p}}, \quad (6)$$

$$\Gamma_0(\delta) \rightarrow \gamma_{1p} \quad \text{при} \quad \delta \rightarrow 0, \quad \Gamma_0(\delta) \rightarrow \gamma_{2p} \quad \text{при} \quad \delta \rightarrow \infty.$$

Выполнение условия $\Gamma_0(\delta = 1) = \gamma_{0p}$, где γ_{0p} — коэффициент Грюнайзена при нормальных условиях, обеспечивается за счет коэффициента A_p в (6), который связан с другими параметрами зависимости соотношением

$$A_p = \frac{\gamma_{0p} - \gamma_{1p}/[1 + (\delta_{mp})^{-a_p}] - \gamma_{2p}/[1 + (\delta_{np})^{b_p}]}{1 - 1/[1 + (\delta_{mp})^{-a_p}] - 1/[1 + (\delta_{np})^{b_p}]}.$$

Параметры a_p , b_p , δ_{mp} , δ_{np} определяют «скорость» выхода функции $\Gamma_{p0}(\delta)$ на асимптотические значения.

При $\delta > \delta_p$ расчет ведется по алгоритму, обеспечивающему переход к зависимости, рассчитанной по теоретической модели для коэффициента Грюнайзена. Данный алгоритм аналогичен алгоритму, реализованному для расчета потенциальных составляющих давления и энергии при $\delta > \delta_c$. Зависимость $\Gamma_0(\delta)$ определяется по формуле

$$\Gamma_0(\delta) = \Gamma_{\text{lim}}(\delta) Y_\Gamma(\delta).$$

Здесь $\Gamma_{\text{lim}}(\delta) = 0.5 + a_{\text{lim}}\delta^{-b_{\text{lim}}} + c_{\text{lim}}\delta^{-d_{\text{lim}}}$ — выражение, аппроксимирующее расчет коэффициента Грюнайзена по одной из теоретических моделей УРС при больших плотностях (см., например, [19]); $Y_\Gamma(\delta) = 1 + (b_{1\Gamma} + b_{2\Gamma}\delta^{-\alpha_\Gamma} + b_{3\Gamma}\delta^{-2\alpha_\Gamma})\delta^{-1}$ — интерполяционная функция. В данной работе при подборе значений параметров для выражения $\Gamma_{\text{lim}}(\delta)$ использованы расчеты коэффициента Грюнайзена по модели однокомпонентной плазмы (ОКП) (см., например, [20, 21]), реализованной в модели ТФПК (модель ТФП [17], дополненная моделью В. П. Копышева для учета вклада ядер [22]). Значения $b_{1\Gamma}$, $b_{2\Gamma}$ и $b_{3\Gamma}$ определяются из условий непрерывности функций, первых и вторых производных в точке δ_p . Параметр α_Γ задает скорость приближения значений $\Gamma_0(\delta)$ к значениям $\Gamma_{\text{lim}}(\delta)$.

Температура плавления рассчитывается с использованием модели Линдемана в форме [23]

$$T_{\text{пл}} = T_{\text{пл}0} \left(\frac{\delta}{\delta_{\text{пл}0}}\right)^{-2/3} \exp\left(2 \int_{\delta_{\text{пл}0}}^\delta \frac{\Gamma_{\text{пл}}(\tau)}{\tau} d\tau\right), \quad (7)$$

где $T_{\text{пл}0}$ и $\delta_{\text{пл}0}$ — температура и относительное сжатие (плотность) вещества в точке плавления при $P = 1$ атм; $\Gamma_{\text{пл}}(\delta)$ — функция, имеющая смысл коэффициента Грюнайзена ядер

на линии плавления, задаваемая в такой же форме, как для коэффициента Грюнайзена ядер $\Gamma_{p0}(\delta)$ при $T = 0$ и $0 \leq \delta \leq \delta_p$ (см. (6)). В описываемой модели параметры зависимости $\Gamma_{пл}(\delta)$ в (7) не связаны с параметрами, используемыми для расчета коэффициента Грюнайзена в уравнении состояния. Подстановка в (7) функции $\Gamma_{пл}(\delta)$ в виде (6) позволяет получить аналитическую зависимость $T_{пл}(\delta)$.

Параметры зависимости (7) определяются при аппроксимации экспериментальных и расчетных данных, характеризующих положение линии плавления в диапазоне изменения плотности от значения в точке плавления при нормальном давлении до значений, при которых справедливы расчеты по модели ОКП. В описываемой модели УРС плавление не рассматривается как процесс, реализующийся в некоторой области состояний. По физическому смыслу модель Линдемана дает оценку границы начала плавления.

Тепловой вклад электронов

Свободная энергия термически возбужденных электронов как функция плотности и температуры задается выражением

$$F_e(\delta, T) = -C_{V0}^e y(\delta, T) T \ln \left(1 + \frac{T}{T_f(\delta, T)} \right). \quad (8)$$

Здесь $C_{V0}^e = 3R/2A$ — изохорная теплоемкость электронов 1 г однократно ионизованного идеального одноатомного газа, R — универсальная газовая постоянная, A — молярная масса; $T_f(\delta, T) = 2C_{V0}^e / [\beta_0 (y(\delta, T) \delta)^{2/3}]$ — функция, имеющая смысл характеристической температуры, определяющей переход от квантовой статистики Ферми — Дирака к статистике Больцмана (β_0 — коэффициент электронной теплоемкости); $y(\delta, T) = Z - [Z - y_0(\delta)][g_1(T)(1 - \zeta(\delta)) + g_2(\delta, T)\zeta(\delta)]$ — функция, эффективно учитывающая изменение среднего числа свободных электронов на один атом при изменении плотности и температуры (Z — атомный номер); $y_0(\delta) = Z_b - \frac{Z_b - Z_a}{1 + (\delta/\delta_{ne})^{a_e}}$ — предел функции $y(\delta, T)$ при $T \rightarrow 0$, Z_a и Z_b — значения функции $y_0(\delta)$ при $\delta = 0$ и $\delta \rightarrow \infty$ соответственно. Функции $g_1(T)$, $g_2(\delta, T)$ и $\zeta(\delta)$ определяются соотношениями

$$g_1(T) = \exp \left[- \left(\frac{T}{\psi_1} \right)^{\alpha_1} \right],$$

$$g_2(\delta, T) = \frac{1}{1 + \{T/[\psi_2(1 + a_\psi \delta^{b_\psi})]\}^{\alpha_2}},$$

$$\zeta(\delta) = \frac{1}{a_\zeta + (\delta/b_\zeta)^{c_\zeta}}.$$

Функция $F_e(\delta, T)$ (8) содержит 14 подгоночных параметров ($\beta_0, \psi_1, \psi_2, a_\psi, b_\psi, \alpha_1, \alpha_2, a_\zeta, b_\zeta, c_\zeta, Z_a, Z_b, a_e, \delta_{ne}$), из них 13 — параметры функции $y(\delta, T)$.

Выражения для свободной энергии и функции $y(\delta, T)$ обеспечивают выполнение следующих асимптотик: при $T \rightarrow 0$

$$F_e(\delta, T) \rightarrow -\frac{\beta_0 T^2}{2\delta^{2/3}} [y_0(\delta)]^{1/3},$$

$$y(\delta, T) \rightarrow y_0(\delta),$$

$$\left(\frac{\partial E_e}{\partial T} \right)_\delta \rightarrow \frac{\beta_0 T}{\delta^{2/3}} [y_0(\delta)]^{1/3},$$

при $T \rightarrow \infty$

$$F_e(\delta, T) \rightarrow -C_{V0}^e Z T \ln \left(\frac{\beta_0 T}{2C_{V0}^e} [Z\delta]^{-2/3} \right),$$

$$y(\delta, T) \rightarrow Z,$$

$$\left(\frac{\partial E_e}{\partial T} \right)_\delta \rightarrow Z C_{V0}^e.$$

Таким образом, при низких температурах асимптотикой для электронной составляющей является первая температурная поправка для вырожденного электронного газа, в которой $F_e(\delta, T) \sim T^2$ [24]. При высоких температурах выполняются асимптотики для полностью ионизованного, описываемого статистикой Больцмана идеального газа с числом электронов Z на один атом [24].

Функция $\zeta(\delta)$, входящая в состав $y(\delta, T)$, задает вес функций $g_1(T)$ и $g_2(\delta, T)$ в определении $y(\delta, T)$ на изохорах. Ограничением для $\zeta(\delta)$ служит условие $0 \leq \zeta(\delta) \leq 1$. Для этого достаточно, чтобы $a_\zeta \geq 1, b_\zeta > 0$. Выражения для $g_1(T)$ и $g_2(\delta, T)$ выбраны такими, чтобы при $T = 0$ они обращались в единицу и, следовательно, выполнялось равенство $y(\delta, T) = y_0(\delta)$. При $T \rightarrow \infty$ функции $g_1(T)$ и $g_2(\delta, T)$ стремятся к нулю и, как следствие, $y(\delta, T) \rightarrow Z$. На параметры этих функций накладывается ограничение: $(\psi_1, a_\psi, b_\psi, \alpha_1, \psi_2, \alpha_2) > 0$.

Таблица 1

Параметры зависимости $D(U)$ вида (9) для Ta, W, Al, Be

Вещество, нормальная плотность, диапазон применимости по скорости	Параметры зависимости $D(U)$ (9)								$D(U = 0)$, км/с
	C_1 , км/с	C_2	C_3 , км/с	C_4 , км/с	C_5 , км/с	C_6	C_7	C_8 , с/км	
Тантал, $\rho_0 = 16.66 \text{ г/см}^3$, $U \lesssim 14 \text{ км/с}$	4.720	1.181	0	0	-1.310	1.440	1.726	0.204	3.421
Вольфрам, $\rho_0 = 19.25 \text{ г/см}^3$, $U \lesssim 6 \text{ км/с}$	3.980	1.172	2.093	14.22	-0.053	-0.720	8.360	0.165	4.015
Алюминий, $\rho_0 = 2.71 \text{ г/см}^3$, $U \lesssim 30 \text{ км/с}$	5.200	1.183	1.830	4.535	0.097	1.794	9.384	0.161	5.295
Бериллий, $\rho_0 = 1.85 \text{ г/см}^3$, $U \lesssim 30 \text{ км/с}$	7.0	1.200	0	0	1.068	1.700	0.675	0.920	8.060

Описанная модель УРС дополнена алгоритмами вычисления термодинамических функций на границе и внутри двухфазной области жидкость — пар.

УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ВОЛЬФРАМА, ТАНТАЛА, БЕРИЛЛИЯ, АЛЮМИНИЯ

Возможности модели продемонстрированы на примере разработки уравнений состояния Ta, W, Al, Be. Значения параметров в УРС определены из условия описания экспериментальных данных и результатов расчетов по различным моделям, характеризующим термодинамические свойства этих металлов. При выборе параметров зависимостей $P_x(\delta)$ использованы приведенные в [25–32] результаты экспериментов по исследованию нормальных изотерм, а также результаты расчетов нулевых изотерм, выполненных методом функционала плотности [33, 34]. При больших плотностях (сжатиях) выбор параметров зависимостей $P_x(\delta)$ проводился при условии описания нулевых изотерм по модели Томаса — Ферми с поправками Д. А. Киржница, Н. Н. Калиткина (модель ТФП) [17].

При подборе параметров тепловых составляющих $P_e(\delta, T)$, $E_e(\delta, T)$, учитывающих вклад электронов в области больших давлений ($P \gtrsim 3 \cdot 10^4 \text{ ГПа}$) и температур ($T \gtrsim 20 \text{ эВ}$), использовались результаты расчетов теплового вклада электронов по модели ТФП [17]. В этой области

состояний мало информации для определения параметров составляющих $P_p(\delta, T)$, $E_p(\delta, T)$, учитывающих вклад ядер. При подборе этих параметров использовалась приведенная в [19] зависимость коэффициента Грюнайзена ядер от плотности, рассчитанная по теоретической модели.

В области относительно низких давлений и температур параметры составляющих уравнений состояния, в которых учитываются вклады электронов $P_e(\delta, T)$, $E_e(\delta, T)$ и ядер $P_p(\delta, T)$, $E_p(\delta, T)$, подбирались при условии, что уравнения состояния описывают имеющиеся в этой области экспериментальные и расчетные данные, характеризующие термодинамические свойства Ta, W, Al, Be. В частности, использовались результаты экспериментов по исследованию ударных адиабат сплошных и пористых образцов, по исследованию скорости звука и изоэнтроп расширения ударно-сжатых веществ, экспериментальные данные по тепловому расширению, положению «линий» плавления, теплоемкости и др. Использовались также оценки положения критической точки двухфазной области жидкость — пар, точки кипения, результаты расчетов состояний на ударной адиабате, полученные по современным моделям, в частности методом функционала плотности.

Начальные приближения для части параметров определены по справочным данным и с привлечением оценок по теоретическим мо-

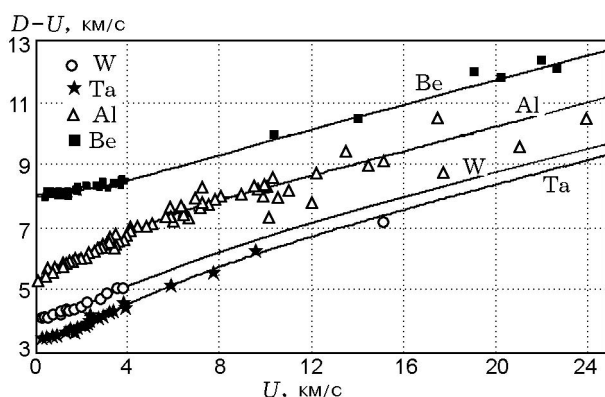


Рис. 1. Зависимость разности скорости фронта ударной волны и массовой скорости сплошных образцов Ta, W, Al, Be от их массовой скорости:

линии — расчет по УРС данной работы, точки — эксперимент: Ta — данные [35, 37–40], W — [35, 36, 40, 48], Al — [35, 37, 38, 40, 44–48], Be — [35, 42, 43, 48, 49]

делям. Проверка описания некоторых экспериментальных и расчетных данных проводилась после подбора параметров УРС. Это позволило оценить возможность предсказания моделью (уравнением состояния) свойств веществ в неисследованных областях. Более детально технология подбора параметров описана в работе [14]. В этой технологии ударная адиабата сплошного вещества рассматривается как опорная зависимость. Такой подход упрощает процедуру подбора параметров УРС. В данной работе для аппроксимации экспериментальных данных на ударных адиабатах сплошных образцов Ta, W, Al, Be использовалась аналитическая зависимость вида

$$D(U) = C_1 + C_2 U + \frac{C_3 U}{U + C_4} + C_5 \sin[C_6 + C_7(1 - \exp(-C_8 U))]. \quad (9)$$

Параметры подобранных по экспериментальным данным [35–49] зависимостей $D(U)$ для Ta, W, Al, Be приведены в табл. 1 вместе с пределами применимости этих зависимостей и оценками скоростей звука при нормальных условиях, полученными по ударно-волновым данным.

Представленные рисунки иллюстрируют сравнение расчетов по УРС с имеющимися экспериментальными данными и расчетами по другим моделям. Больше всего таких данных

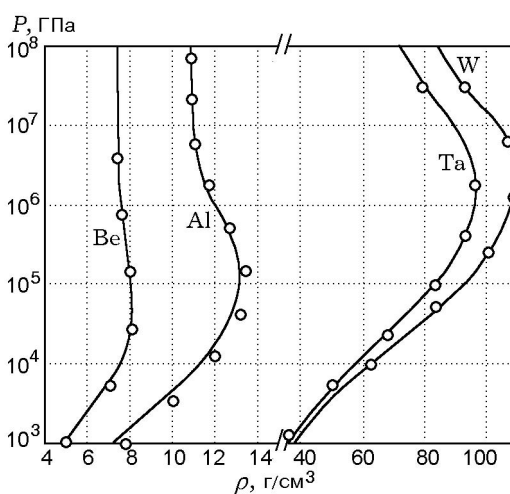


Рис. 2. Зависимость давления от плотности на ударных адиабатах сплошных образцов Ta, W, Al, Be:

линии — расчет по УРС данной работы, точки — расчет по ТФПК [17, 22]

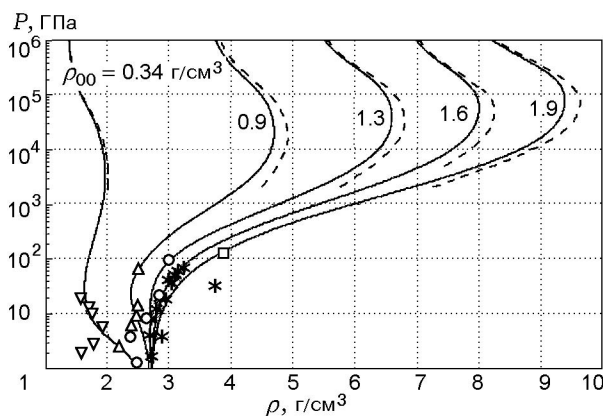


Рис. 3. Зависимость давления от плотности на ударных адиабатах пористого Al:

сплошные линии — расчет по УРС данной работы, штриховые — ТФПК [17, 22], точки — эксперимент [40, 50–52]

имеется для Ta. Это один из наиболее исследованных в экспериментах и расчетах металлов, описание его термодинамических характеристик является хорошим тестом для проверки модели УРС.

Приведенные на рис. 1 зависимости разности скорости фронта ударной волны и массовой скорости за фронтом ($D-U$) от массовой скорости U , рассчитанные по УРС данной работы, в целом удовлетворительно описывают экспериментальные данные [35–49], полученные при

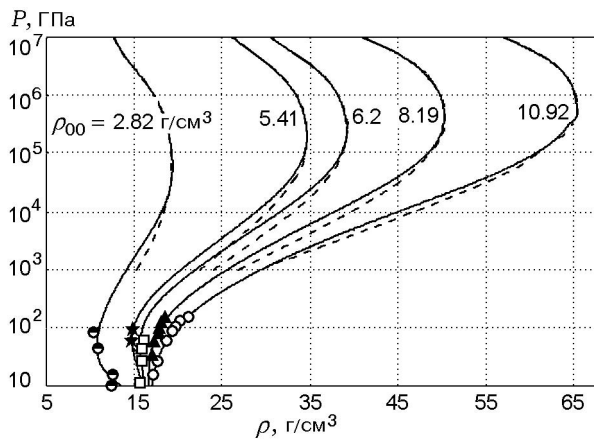


Рис. 4. Зависимость давления от плотности на ударных адиабатах пористого Та: сплошные линии — расчет по УРС данной работы, штриховые — по ТФПК [17, 22], точки — эксперимент [40]

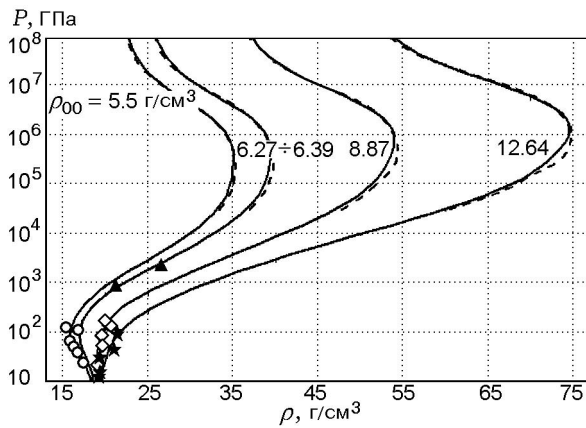


Рис. 5. Зависимость давления от плотности на ударных адиабатах пористого W: сплошные линии — расчет по УРС данной работы, штриховые — по ТФПК [17, 22], точки — эксперимент [40, 41]

исследовании ударных адиабат сплошных образцов Та, W, Al, Be.

На рис. 2 представлены ударные адиабаты сплошных образцов Та, W, Al, Be. В области больших давлений ($P > 10^4$ ГПа) расчеты по УРС данной работы хорошо описывают расчеты по модели ТФПК [17, 22].

На рис. 3–5 показаны зависимости давления от плотности для ударных адиабат пористого алюминия ($\rho_{00} = 0.34 \div 1.9$ г/см³), тантала ($\rho_{00} = 2.82 \div 10.92$ г/см³), вольфрама ($\rho_{00} = 5.5 \div 12.64$ г/см³), рассчитанные соответственно по УРС и по модели ТФПК [17, 22]. В целом

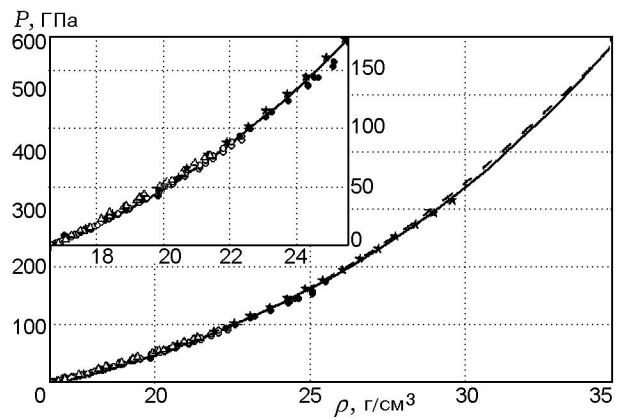


Рис. 6. Зависимости давления от плотности образца Та на изотерме $T = 293$ К: сплошная линия — расчет по УРС данной работы, штриховая — наш расчет по программе LMTART [53] для решетки ОЦК, точки — эксперимент [25–28]

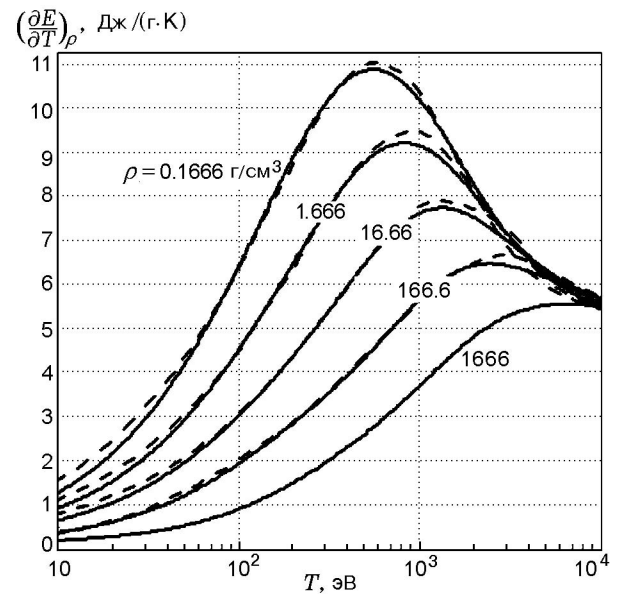


Рис. 7. Зависимости удельной изохорной теплоемкости Та от температуры вдоль изохор: сплошные линии — расчет по УРС данной работы, штриховые — по ТФПК [17, 22],

наблюдается хорошее согласие между расчетами по УРС данной работы и экспериментальными данными [40, 41, 50–52]. При высоких давлениях ($P \gtrsim 10^3 \div 10^4$ ГПа) наши расчеты по УРС близки к расчетам по модели ТФПК [17, 22].

На рис. 6 показано положение нормальных изотерм ($T = 293$ К), рассчитанных нами по уравнению состояния Та и методом функцио-

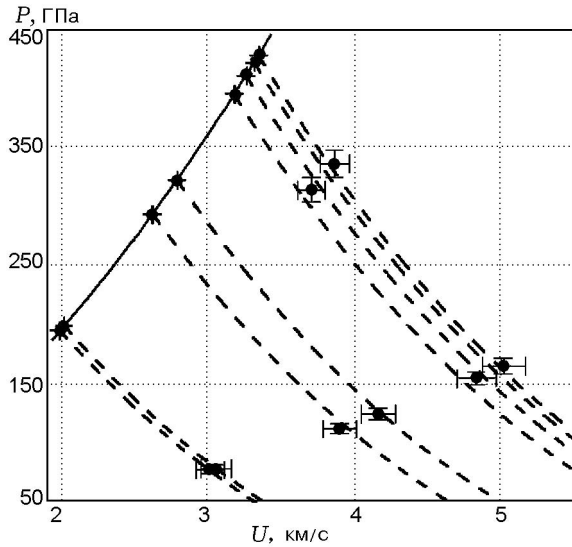


Рис. 8. Зависимости давления от массовой скорости на ударной адиабате и изоэнтропах расширения Та:

ударная адиабата (сплошная линия), изоэнтропы (штриховые линии) — расчет по УРС данной работы, точки — эксперимент [38]

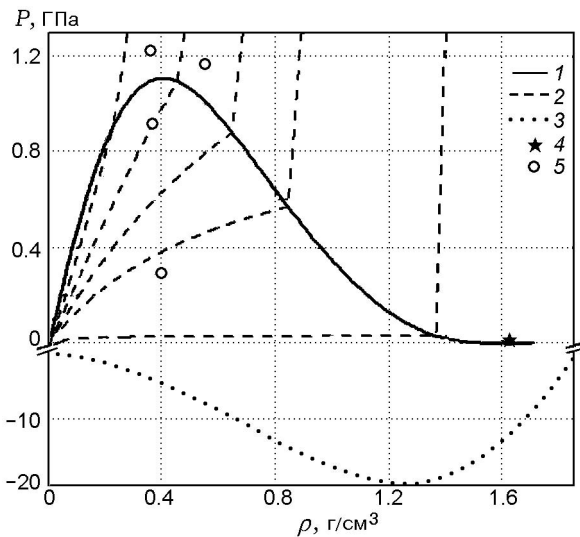


Рис. 9. Зависимости от плотности Be потенциального и полного давления на границе двухфазной области жидкость — пар и на изоэнтропах, проходящих через двухфазную область:

расчет по УРС данной работы: 1 — граница двухфазной области, 2 — изоэнтропы расширения, 3 — потенциальное давление, 4 — точка кипения, 5 — данные [3, 54, 55] по оценке положения критической точки Be

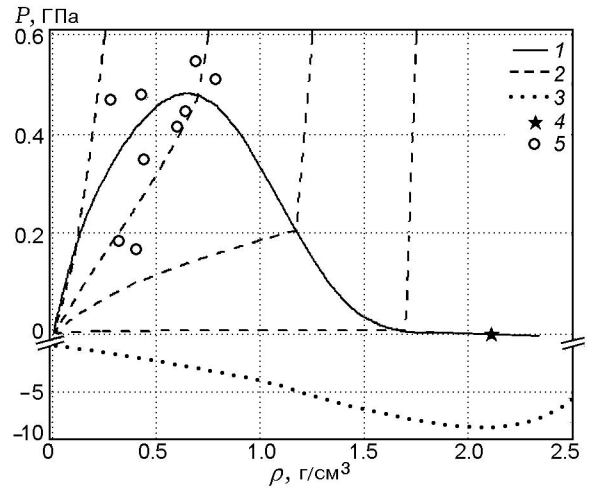


Рис. 10. Зависимости от плотности Al потенциального и полного давления на границе двухфазной области жидкость — пар и на изоэнтропах, проходящих через двухфазную область:

расчет по УРС данной работы: 1 — граница двухфазной области, 2 — изоэнтропы расширения, 3 — потенциальное давление, 4 — точка кипения, 5 — данные [54–56] по оценке положения критической точки Al

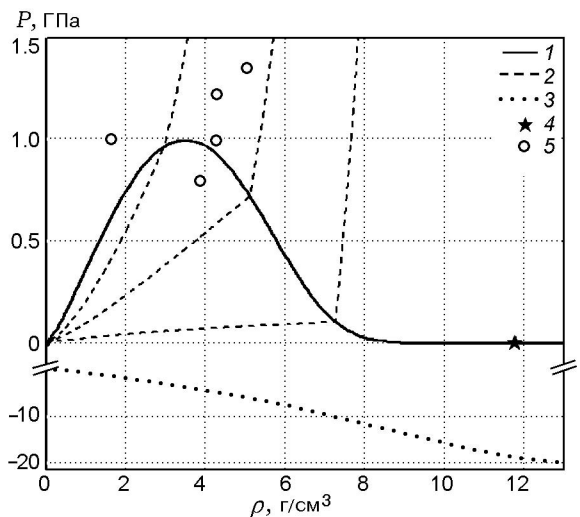


Рис. 11. Зависимости от плотности Та потенциального и полного давления на границе двухфазной области жидкость — пар и на изоэнтропах, проходящих через двухфазную область:

расчет по УРС данной работы: 1 — граница двухфазной области, 2 — изоэнтропы расширения, 3 — потенциальное давление, 4 — точка кипения, 5 — данные [3, 54, 55, 57] по оценке положения критической точки Та

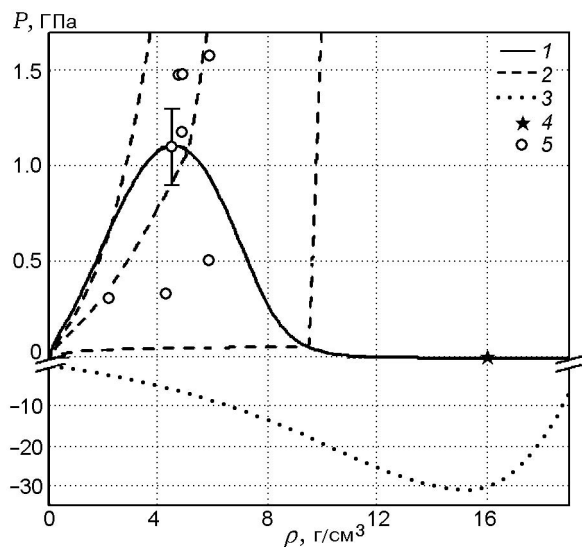


Рис. 12. Зависимости от плотности W потенциального и полного давления на границе двухфазной области жидкость — пар и на изоэнтропах, проходящих через двухфазную область:

расчет по УРС данной работы: 1 — граница двухфазной области, 2 — изоэнтропы расширения, 3 — потенциальное давление, 4 — точка кипения, 5 — данные [3, 54, 55, 59–62] по оценке положения критической точки W

нала плотности по программе LMTART [53] для решетки ОЦК. Результаты наших расчетов хорошо описывают как расчеты, выполненные методом функционала плотности, так и экспериментальные данные [25–28].

На рис. 7 представлены зависимости изохорной теплоемкости $C_V(T)$ тантала для пяти изохор, рассчитанные по УРС данной работы и по модели ТФПК [17, 22]. При температурах выше 10 эВ расчеты по УРС близки к расчетам по модели ТФПК и передают вид зависимостей $C_V(T)$, характерный для статистических моделей теоретических УРС с усредненным описанием электронных оболочек без детального учета их структуры.

На рис. 8 видно, что зависимости давления от массовой скорости, рассчитанные по УРС на изоэнтропах расширения ударно-сжатого Та, в пределах ошибки описывают экспериментальные данные [38].

На рис. 9–12 для Ве Al, Та, W приведены зависимости от плотности образцов потенциального и полного давления на границе двухфазной области жидкость — пар и на изоэнтропах, проходящих через двухфазную область, а

также данные разных авторов. Критические точки, рассчитанные по УРС данной работы, находятся в пределах разброса оценок положения критических точек Ве Al, Та, W, приведенных в [3, 54–62].

Представленные на рис. 13 результаты показывают, что зависимости объемных скоростей звука от давления в ударно-сжатых сплошных образцах Та, W, Al, Ве, рассчитанные по УРС данной работы, описывают данные экспериментов [35, 40, 63–69] по объемной скорости звука.

На рис. 14 приведены рассчитанные для Та, W, Al, Ве зависимости $T(P)$ на линиях плавления, а также экспериментальные данные [34, 63, 70–76]. Отметим некоторые особенности представленных зависимостей. В экспериментах [70, 71] получены противоречащие друг другу данные по зависимости температуры плавления Та от давления. В данной работе при определении положения линии плавления Та мы ориентировались на результаты экспериментов [71]. Для W известны эксперименты по исследованию линии плавления [70, 75, 76]. Данные [70] показывают слабую зависимость температуры плавления W от давления до $P \approx 100$ ГПа, что противоречит результатам экспериментов [75], характеризующим начальный участок линии плавления при $P \lesssim 4$ ГПа. Приведенная на рис. 14 зависимость $T(P)$ на линии плавления W получена в результате аппроксимации эксперименталь-

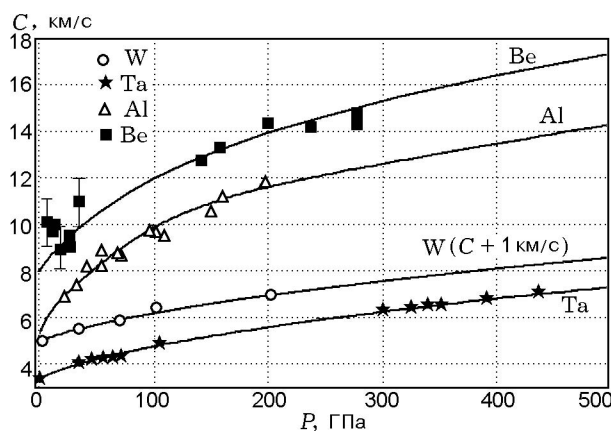


Рис. 13. Зависимость объемных скоростей звука от давления в ударно-сжатых сплошных образцах Та, W, Al, Ве:

линии — расчет по УРС данной работы, точки — эксперимент, приведенный в работах: Та — [35, 63–65], W — [66], Al — [35, 40, 67], Ве — [68, 69]

Таблица 2

Температура, плотность и давление при плавлении на ударной адиабате, в точке кипения и в критической точке двухфазной области жидкость — пар

Вещество	Точка начала плавления на ударной адиабате			Точка кипения ($P = 10^{-4}$ ГПа)		Критическая точка		
	$T_{пл}$, К	$\rho_{пл}$, г/см ³	$P_{пл}$, ГПа	$T_{кип}$, К	$\rho_{кип}$, г/см ³	$T_{кр}$, К	$\rho_{кр}$, г/см ³	$P_{кр}$, ГПа
Тантал	7 705	26.40	249	5 560	11.78	12 784	3.491	0.9996
	13 750 [8]	27.64 [8]	320 [8]	$5\,698 \pm 100$ [78], 5 707 [77]	12.4 [77]	13 530 [3]	4.255 [3]	0.993 [3]
Вольфрам	8 570	29.67	354	5 960	16	16 140	4.54	1.10
	17 600 [8]	31.91 [8]	496 [8]	5 930 [78], 5 970 [77]	14.4 [77]	15 750 [3]	4.854 [3]	1.180 [3]
Алюминий	4 673	4.34	121	2 600	2.11	7 755	0.658	0.472
	4 700 [8]	4.36 [8]	120 [8]	2 740 [78], 2 723 [77]	1.893 [77]	8 000 [55]	0.64 [55]	0.447 [55]
Бериллий	3 208	3.08	162	2 720	1.62	8 883	0.40	1.111
	—	—	—	2 757 [77]	1.4 [77]	8 877 [3]	0.398 [3]	0.287 [3]

Примечание. Для каждого вещества в верхней строке приведены данные, полученные в расчетах по УРС данной работы, в нижней строке — данные из литературных источников.

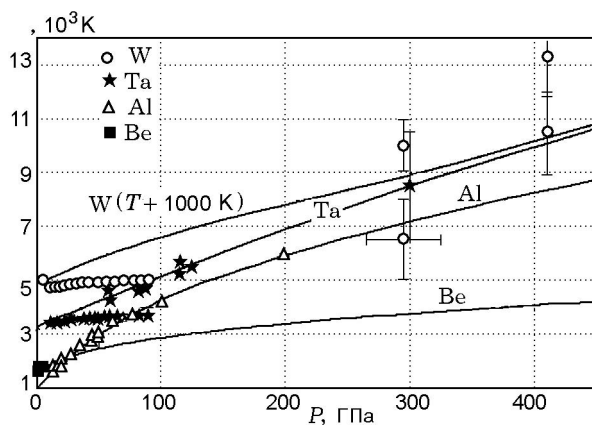


Рис. 14. Зависимости температуры плавления Be, Al, Ta, W от давления:

линии — расчет по УРС данной работы, точки — эксперимент и расчетные оценки: W — данные [70, 75, 76], Ta — [34, 70, 71, 63], Al — [73, 74], Be — [72]

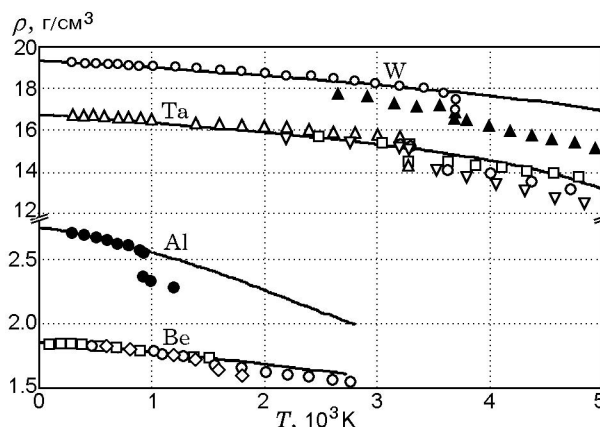


Рис. 15. Зависимости плотности образцов от температуры в W, Ta, Al, Be при нормальном давлении:

линии — расчет по УРС данной работы, точки — эксперимент: W — данные [79, 80], Ta — [79, 83], Al — [79], Be — [79, 81, 82]

ных данных [75], оценок [76] по положению линии плавления W при высоких давлениях, расчетов линии плавления по модели ОКП [20, 21].

В табл. 2 для W, Ta, Al, Be для сравнения представлены результаты расчета по температуре, плотности и давлению при плавлении на ударной адиабате и в критической точке двухфазной области жидкость — пар по УРС дан-

ной работы и УРС работ [3, 8]. Расчеты температуры и плотности в точке кипения по УРС данной работы сравниваются со справочными данными [55, 77, 78].

На рис. 15 приведены рассчитанные по УРС данной работы зависимости плотности W, Ta, Al, Be от температуры при атмосферном давлении и экспериментальные дан-

ные [79–83] по тепловому расширению этих металлов. Расчеты по УРС хорошо согласуются с экспериментальными данными для твердых фаз W, Ta, Al, Be.

Представленные на рис. 1–15 и в табл. 2 результаты показывают, что описанная выше модель позволяет разрабатывать уравнения состояния, ориентированные на описание термодинамических свойств металлов как в экспериментально исследованных областях, так и в областях, доступных для описания теоретическими моделями УРС.

Авторы выражают искреннюю благодарность рецензенту за ценные замечания, способствовавшие улучшению данной работы.

ЛИТЕРАТУРА

- Альтшулер Л. В., Бушман А. В., Жерноклетов М. В., Зубарев В. Н., Леонтьев А. А., Фортов В. Е. Изэнтропы разгрузки и уравнение состояния металлов при высоких плотностях энергии // ЖЭТФ. — 1980. — Т. 78. — С. 741–760.
- Бушман А. В., Ломоносов И. В., Фортов В. Е. Уравнения состояния металлов при высоких плотностях энергии. — Черногоровка, 1992.
- Ломоносов И. В. Фазовые диаграммы и термодинамические свойства металлов при высоких давлениях и температурах: дис... д-ра физ.-мат. наук. — Черногоровка, 1999.
- Баско М. М. Уравнение состояния металлов в приближении среднего иона // Теплофизика высоких температур. — 1985. — Т. 23, № 3. — С. 483–491.
- More R. M., Warren K. H., Young D. A., Zimmerman G. B. A new quotidian equation of state (QEOS) for hot dense matter // Phys. Fluids. — 1988. — V. 31, N 10. — P. 3059–3078.
- Альтшулер Л. В., Брусникин С. Е. Моделирование высокоэнергетических процессов и широкодиапазонные уравнения состояния // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов. — 1992. — Вып. 1. — С. 34–42.
- Копышев В. П., Медведев А. Б. Термодинамическая модель сжимаемого коволюма. — Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 1995.
- Медведев А. Б. Модификация модели Вандер-Ваальса для плотных состояний // Ударные волны и экстремальные состояния вещества / под ред. В. Е. Фортова и др. — М.: Наука, 2000. — С. 315–341.
- Прут В. В. Полуэмпирическая модель уравнения состояния конденсированных сред // Теплофизика высоких температур. — 2005. — Т. 43, № 5. — С. 713–726.
- Хищенко К. В., Шемякин О. П. Полуэмпирическое уравнение состояния алюминия на основе модели Томаса — Ферми // Физика экстремальных состояний вещества — 2006 / ред. В. Е. Фортов и др. — Черногоровка: ИПХФ РАН, 2006.
- Shemyakin O. P., Levashov P. R., Khishchenko K. V. Equation of state of Al based on the Thomas — Fermi model // Physics of Extreme States of Matter — 2011 / V. E. Fortov et al. (Eds). — Chernogolovka: IPSP RAS, 2011.
- Feynman R., Metropolis N., Teller E. Equations of state of elements based on the generalized Fermi — Thomas theory // Phys. Rev. — 1949. — V. 75, N 10. — P. 1561–1573.
- Кормер С. Б., Фунтиков А. И., Урлин В. Д., Колесникова А. Н. Динамическое сжатие пористых металлов и уравнение состояния с переменной теплоемкостью при высоких температурах // ЖЭТФ. — 1962. — Т. 42, вып. 3. — С. 686–702.
- Гордеев Д. Г., Гударенко Л. Ф., Жерноклетов М. В., Куделькин В. Г., Мочалов М. А. Полуэмпирическое уравнение состояния металлов. Уравнение состояния алюминия // Физика горения и взрыва. — 2008. — Т. 44, № 2. — С. 61–75.
- Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. К. Методы сплайн-функций. — М.: Наука, 1980.
- Kerley G. I. User's manual for PANDA: A computer code for calculating equations of state // Los Alamos Nat. Lab. Rep. LA-8833-M. — November 1981.
- Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии. — М., 1975. — (Препринт / АН СССР. ИПМ; № 35).
- Гордеев Д. Г., Ломайкин А. И. Аппроксимация функции Дебая $D_3(x)$ в области $0 \leq x < \infty$ функцией класса C^2 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов. — 2008. — Вып. 1. — С. 42–50.
- Hitose Nagara, Tuto Nakamura. Theory of lattice-dynamical properties of compressed solids // Phys. Rev. B. — 1985. — V. 31, N 4. — P. 1844–1855.
- Hansen J. P. Statistical mechanics of dense ionized matter. I. Equilibrium properties of the classical one-component plasma // Phys. Rev. A. — 1973. — V. 8, N 6. — P. 3096–3109.
- Pollock E. L., Hansen J. P. Statistical mechanics of dense ionized matter. II. Equilibrium properties and melting transition of the crystallized one-component plasma // Ibid. — P. 3110–3122.
- Копышев В. П. О термодинамике ядер одноатомного вещества. — М., 1978. — (Препринт / АН СССР. ИПМ; № 59).

23. **Grover R.** Liquid metal equation of state based on scaling // *Chem. Phys.* — 1971. — V. 55, N 7. — P. 3435–3441.
24. **Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.** Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — М.: Наука, 1966.
25. **Cynn H., Yoo C. S.** Equation of state of tantalum to 174 GPa // *Phys. Rev. B.* — 1999. — V. 59, N 13. — P. 8526–8529.
26. **Eggert J. H., Bastea M., Braun D., Fujino D., Rygg R., Smith R., Hawreliak J., Hicks D. G., Collins G.** Laser-induced ramp compression of tantalum and iron to over 300 GPa: EOS and x-ray diffraction // *Lawrence Livermore Nat. Lab., LLNL-CONF-425256.* — March 9, 2010.
27. **Xu J., Mao H.-K., Bell P. M.** Position-sensitive x-ray diffraction: hydrostatic compressibility of argon, tantalum, and copper to 769 kbar // *High Temp. — High Pressures.* — 1984. — V. 16. — P. 495–499.
28. **Dewaele A., Loubeyre P., Mezouar M.** Equations of state of six metals above 94 GPa // *Phys. Rev. B.* — 2004. — V. 70. — 094112 (1–8).
29. **Akahama Y., Nishimura M., Kinoshita K., Kawamura H., Ohishi Y.** Evidence of a fcc-hcp transition in aluminum at multimegabar pressure // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — V. 96. — 045505.
30. **Evans W. J., Lipp M. J., Cynn H., Yoo C. S., Somayazulu M., Häusermann D., Shen G., Prakapenka V.** X-ray diffraction and Raman studies of beryllium: Static and elastic properties at high pressures // *Phys. Rev. B.* — 2005. — V. 72. — 094113 (1–6).
31. **Velisavljevic, Chestnut G. N., Vohra Y. K., Weir S. T., Malba V., Akella J.** Structural and electrical properties of beryllium metal to 66 GPa studied using designer diamond anvils // *Phys. Rev. B.* — 2002. — V. 65. — 172107 (1–4).
32. **Ruoff A. L., Xia H., Luo H., Vohra Y. K.** Miniaturization techniques for obtaining static pressures comparable to the pressure at the center of the earth: X-ray diffraction at 416 GPa // *Rev. Sci. Instrum.* — 1990. — V. 61, N 12. — P. 3830–3833.
33. **Wang Yi., Chen D., Zhang X.** Calculated equation of state of Al, Cu, Ta, Mo, and W to 1000 GPa // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — V. 84, N 15. — P. 3220–3223.
34. **Foata-Prestavoine M., Robert G., Nadal M. H.** First-principles study of the relations between the elastic constants, phonon dispersion curves, and melting temperatures of bcc Ta at pressures up to 1000 GPa // *Phys. Rev. B.* — 2007. — V. 76. — 104104 (1–10).
35. **LASL Shock Hugoniot Data / S. P. Marsh** (Ed.). — Berkley: Univ. of California Press, 1980.
36. **Hixson R. S., Fritz J. N.** Shock compression of tungsten and molybdenum // *J. Appl. Phys.* — 1992. — V. 71, N 4. — P. 1721–1728.
37. **Mitchell A. C., Nellis W. J.** Shock compression of aluminum, copper, and tantalum // *J. Appl. Phys.* — 1981. — V. 52, N 5. — P. 3363–3374.
38. **Nellis W. J., Mitchell A. C., Young D. A.** Equation-of-state measurements for aluminum, copper, and tantalum in the pressure range 80–440 GPa (0.8–4.4 Mbar) // *J. Appl. Phys.* — 2003. — V. 93, N 1. — P. 304–310.
39. **Holmes N. C., Moriarty J. A., Gathers G. R., Nellis W. J.** The equation of state of platinum to 660 GPa (6.6 Mbar) // *J. Appl. Phys.* — 1989. — V. 66, N 7. — P. 2962–2967.
40. **Трунин Р. Ф., Гударенко Л. Ф., Жерноклетов М. В., Симаков Г. В.** Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ / под ред. Р. Ф. Трунина. — Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2006.
41. **Boade R. R.** Dynamic compression of porous tungsten // *J. Appl. Phys.* — 1969. — V. 40, N 9. — P. 3781–3785.
42. **Nellis W. J., Moriarty J. A., Michell A. C., Holmes N. C.** Equation of state of beryllium at shock pressure of 0.4–1.1 TPa (4–11 Mbar) // *J. Appl. Phys.* — 1997. — V. 82. — P. 2225–2227.
43. **Cauble R., Perry T. S., Bach D. R., Budil K. S., Hammel B. A., Collins G. W., Gold D. M., Dunn J., Celiers P., Da Silva L. B., Foord M. E., Wallace R. J., Stewart R. E., Woosley N. C.** Absolute equation-of-state data in the 10–40 Mbar (1–4 TPa) regime // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — V. 80, N 6. — P. 1248–1251.
44. **Knudson M. D., Asay J. R., Deeney C.** Adiabatic release measurements in aluminum from 240 to 500 GPa states on the principal Hugoniot // *J. Appl. Phys.* — 2005. — V. 97. — 073514 (1–14).
45. **Ragan III C. E.** Shock-wave experiments at threefold compression // *Phys. Rev. A.* — 1984. — V. 29, N 3. — P. 1391–1402.
46. **Knudson M. D., Lemke R. W., Hayes D. B., Hall C. A., Deeney C., Asay J. R.** Near-absolute hugoniot measurements in aluminum to 500 GPa using a magnetically accelerated flyer technique // *J. Appl. Phys.* — 2003. — V. 94, N 7. — P. 4420–4431.
47. **Mitchell A. C., Nellis W. J., Moriarty J. A., Heinle R. A., Holmes N. C., Tipton R. E., Repp G. W.** Equation of state of Al, Cu, Mo, and Pb at shock pressures up to 2.4 TPa (24 Mbar) // *J. Appl. Phys.* — 1991. — V. 69, N 5. — P. 2981–2986.
48. **Ragan III C. E.** Shock compression measurements at 1 to 7 TPa // *Phys. Rev. A.* — 1982. — V. 25, N 6. — P. 3360–3375.
49. **Wise J. R., Chhabildas L. C., Asay J. L.** Shock compression of beryllium // *Shock Waves in Condensed Matter* — 1981 / W. J. Nellis, L. Seaman, R. A. Graham (Eds.). — Amer. Inst. of Physics, 1982. — P. 417–421.

50. **Воропинов А. И., Илькаева Л. А., Подурец М. А., Симаков Г. В., Трунин Р. Ф.** Ударные адиабаты пористых алюминия, титана, меди и вольфрама и адиабаты Пуассона пористых меди и вольфрама в области неполного закрытия пор. Термодинамическая модель и эксперимент // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теорет. и прикл. физика. — 2005. — Вып. 1–2. — С. 45–50.
51. **Asay J. R., Hayes D. B.** Shock-compression and release behavior near melt states in aluminum // *J. Appl. Phys.* — 1975. — V. 46, N 11. — P. 4789–4799.
52. **Qiang Wu, Fuqian Jing.** Thermodynamic equation of state and application to Hugoniot predictions for porous materials // *J. Appl. Phys.* — 1996. — V. 80, N 8. — P. 4343–4349.
53. **Savrasov S. Y.** Linear-response theory and lattice dynamics: A muffin-tin-orbital approach // *Phys. Rev. B.* — 1996. — V. 54. — P. 16470.
54. **Ohse R. W., Tippelskirch H.** The critical constants of the elements and of some refractory materials with high critical temperatures (A review) // *High Temp. — High Pressures.* — 1977. — V. 9. — P. 367–385.
55. **Фортов В. Е., Дремин А. Н., Леонтьев А. А.** Оценка параметров критической точки // *Теплофизика высоких температур.* — 1975. — Т. 13, № 5. — С. 1072–1080.
56. **Faussurier G., Blancard C., Silvestrelli P. L.** Evaluation of aluminum critical point using an ab initio variational approach // *Phys. Rev. B.* — 2009. — V. 79. — 134202.
57. **Gathers G. R.** Dynamic methods for investigating thermophysical properties of matter at very high temperatures and pressures // *Rep. Progr. Phys.* — 1986. — V. 49. — P. 341–396.
58. **Likalter A. A.** Equation of state of metallic fluids near the critical point of phase transition // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — V. 53. — P. 4386.
59. **Fucke U., Seydel W.** Improved experimental determination of critical point data for tungsten // *High Temp. — High Pressures.* — 1980. — V. 12, N 4. — P. 419–432.
60. **Ternovoi V., Filimonov A., Fortov V., Gordon Yu., Nikolaev D., Pyalling A.** Liquid-vapor phase boundaries determination by dynamic experimental method // *Bull. Amer. Phys. Soc.* — 1999. — V. 44, N 2. — P. 95.
61. **Young D. A., Alder B. J.** Critical point of metals from the van der Waals model // *Phys. Rev. Ser. A.* — 1971. — V. 3, N 1. — P. 364–371.
62. **Rakhel A. D., Kloss A., Hess H.** On the critical point of tungsten // *Intern. J. Thermophys.* — 2002. — V. 23, N 5. — P. 1369.
63. **Brown J. M., Shaner J. W.** Rarefaction velocities in shocked tantalum and the high-pressure melting point // *Shock Waves in Condensed Matter* — 1983 / J. R. Asay et al. (Eds.). — Amsterdam: North-Holland, 1984. — P. 91.
64. **Cai L.-K., Zeng Z.-Y., Zhang X.-L., Hu J.-B.** Experimental research on high pressure phase transitions of Mo and Ta // 8th Intern. Conf. «New models and hydrocodes for shock wave processes in condensed matter», Paris, 24–28 May 2010.
65. **Burakovsky L., Chen S. P., Preston D. L., Belonoshko A. B., Rosengren A., Mikhaylushkin A. S., Simak S. I., Moriarty J. A.** High-pressure — high-temperature polymorphism in Ta: Resolving an ongoing experimental controversy // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. — V. 104. — 255702 (1–4).
66. **Duffy T. S., Ahrens T. J.** Sound velocities at high pressure and temperature and their geophysical implications // *J. Geophys. Res.* — 1992. — V. 97, N 84. — P. 4503–4520.
67. **Xianwen Ran, Yuying Yu, Hua Tan, Wenhui Tang.** Behavior of aluminum shear modulus in solid-liquid mixed phase: Estimation with percolation theory // *J. Appl. Phys.* — 2008. — V. 103. — 103539 (1–5).
68. **Dremov V. V., Karavaev A. V., Sapozhnikov F. A., Vorobyova M. A., Souldard L.** Molecular dynamics simulation of thermodynamic and mechanical properties of Be (Pt II) // *Shock Compression of Condensed Matter* — 2009 / M. L. Elert, W. T. Buttler, M. D. Furnish, W. W. Anderson, W. G. Proud (Eds.). — Amer. Inst. of Physics, 2009. — P. 837–840.
69. **Chhabildas L. C., Wise J. L., Asay J. R.** Reshock and release behavior of beryllium // *Shock Waves in Condensed Matter* — 1981 / W. J. Nellis, L. Seaman, R. A. Graham (Eds.). — Amer. Inst. of Physics, 1982. — P. 422–426.
70. **Errandonea D., Schwager B., Ditz R., Gessmann C., Boehler R., Ross M.** Systematics of transition metal melting // *Phys. Rev. B.* — 2001. — V. 63. — 132104 (1–4).
71. **Dewaele A., Mezouar M., Guignot N., Loubeyre P.** High melting points of tantalum in a laser-heated diamond anvil cell // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. — V. 104. — 255701 (1–4).
72. **Тонков Е. Ю.** Фазовые диаграммы элементов при высоком давлении. — М.: Наука, 1979.
73. **Синько Г. В., Смирнов Н. А.** О существовании структурного перехода в алюминии при давлениях ~1.5 Мбар и температуре ≥ 1000 К // IX Харитоновские чтения. — Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2007. — С. 287–291.
74. **Chisolm E. D., Scott D. C., Duane C. W.** Test of theoretical equation of state for elemental solids and liquids // *Phys. Rev. B.* — 2003. — V. 68. — P. 104103. (1–12).
75. **Kloss A., Hess H., Schneidenbach H., Grossjohann R.** Scanning the melting curve of tungsten by a submicrosecond wire-explosion experiment // *Intern. J. Thermophys.* — 1999. — V. 20, N 4. — P. 1199–1209.

76. **Feng Xi, Lingcang Cai.** Theoretical study of melting curves on Ta, Mo, and W at high pressures // *Physica. B.* — 2008. — V. 403. — P. 2065–2070.
77. **Морачевский А. Г., Сладков И. Б.** Термодинамические расчеты в металлургии: справочник. — М.: Металлургия, 1993.
78. **Элементы:** справочник / под ред. Дж. Эмсли. — М.: Мир, 1993.
79. **Зиновьев В. Е.** Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. — М.: Металлургия, 1989.
80. **Hixson R. S., Winkler M. A.** Thermophysical properties of solid and liquid tungsten // *Intern. J. Thermophys.* — 1990. — V. 11, N 4. — P. 709.
81. **Свойства** элементов: справочник / под ред. М. Е. Дрица. — М.: Металлургия, 1985.
82. **Kerley G. I.** Equations of State for Be, Ni, W, and Au // *Sandia Report SAND 2003-3784.* — October 2003.
83. **Shock Wave DataBase.** [Электронный ресурс]: a collection of numerous shock-wave experimental points. — <http://teos.ficp.ac.ru/rusbank/catsearch.php>.

*Поступила в редакцию 12/VII 2011 г.,
в окончательном варианте — 25/XI 2011 г.*
