

# ШИРОКОДИАПАЗОННОЕ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ВОЛЬФРАМА С ЭФФЕКТИВНЫМ УЧЕТОМ ИОНИЗАЦИИ

А. А. Каякин, Д. Г. Гордеев, Л. Ф. Гударенко<sup>1</sup>, В. Г. Куделькин

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Современные теоретические модели уравнений состояния (УРС) позволяют проводить вычисление термодинамических характеристик вещества лишь на отдельных участках фазовой плоскости. Ввиду принципиальных трудностей последовательного теоретического подхода при создании термодинамических моделей используются определенные допущения и упрощения. Эти упрощения не являются универсальными, так как относительная значимость физических факторов, определяющих термодинамику, отличается в областях с разной температурой и плотностью.

Общепринятый подход при построении уравнений состояния 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 численных значений свободных параметров в этих зависимостях. В полуэмпирических моделях неточность правдоподобных физических представлений компенсируется введением в модель свободных параметров.

Представленная в данной работе модель получена в результате модификации модели уравнения состояния, описанного в [1, 2]. При модификации усовершенствованы алгоритмы расчета вклада в давление и энергию электронов – введены соотношения, эффективно учитывающие влияние ионизации на поведение термодинамических функций. Усложнена также 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:  $\rho$  – 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 из составляющих (1) вместо плотности  $\rho$  используется безразмерный параметр  $\delta = \rho/\rho_0$ , характеризующий отношение текущей плотности к плотности при нормальных условиях.

**Потенциальные составляющие в давлении и энергии.** В зависимостях  $P_x(\delta)$ , используемых в данной модели, выделено три участка:

$$0 \leq \delta < 1; \quad 1 \leq \delta \leq \delta_c; \quad \delta > \delta_c,$$

где  $\delta_c$  – значение относительного сжатия 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  $0 \leq \delta < 1$  для представления потенциальной составляющей энергии используется аналитическая зависимость:

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

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

$$P_x|_{\delta=1} = P_{x0}; \quad P_x|_{\delta=0} = 0; \quad P_x|_{\delta < 1} < 0; \quad E_x|_{\delta=1} = E_{x0}; \\ E_x|_{\delta=0} = Q_{св}; \quad \frac{dP_x}{d\delta}|_{\delta=1} = P'_{x0}; \quad \frac{d^2P_x}{d\delta^2}|_{\delta=1} = P''_{x0}. \quad (3)$$

Последние два условия означают сшивку потенциального давления до второй производной с расчетами по формулам, предназначенным для описания потенциальных составляющих на участке  $1 \leq \delta \leq \delta_c$ .

$P'_{x0}$ ,  $P''_{x0}$  – соответственно первая и вторая производная, 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. Значение потенциального давления в точке  $\delta = 1$  определяется разностью:  $P_0 - P_T$  ( $\delta = 1$ ,  $T = 293$  К), где  $P_T = P_p + P_e$ . Значение  $P_x = 0$  будет достигаться

<sup>1</sup> Gud@vniief.ru

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

Из условий (3) можно получить формулы для определения четырех свободных параметров выражения (2). Значения оставшихся двух параметров могут быть определены из условия наилучшего описания критической точки двухфазной области жидкость-пар, точки кипения и данных, полученных в ударно волновых экспериментах при исследовании изэнтроп расширения и ударных адиабат сильно пористых образцов.

**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 тепловых составляющих (подробнее см., например, [2]). В УРС при расчете  $P_x(\delta)$ ,  $E_x(\delta)$  используются не таблицы, полученные при подборе параметров, а результаты их аппроксимации, выполненной с использованием интерполяционных кубических сплайнов класса  $C^2$  [3].

**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 [0]. По данному алгоритму при  $\delta \geq \delta_c$  для расчета потенциальной энергии используется следующая формула:

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

где  $E_{\text{ТФП}}(\delta)$  – энергия, рассчитываемая по модели Томаса–Ферми с поправками (ТФП) [0]. Формула (4) не изменится, если вместо модели ТФП будет использована другая модель для расчета  $E_x(\delta)$  в области больших плотностей и давлений.

$$Y(\delta) = 1 + (b_1 + b_2\delta^{-\alpha} + b_3\delta^{-2\alpha})\delta^{-1} - \text{интерполяционная функция.}$$

Параметр  $\alpha$  определяет скорость приближения значений потенциального давления, рассчитанного 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  $\Delta E_x$ ,  $b_1$ ,  $b_0$  и  $b_3$  определяются из условий непрерывности функций и их производных в точке  $\delta_c$ :

$$E_x(\delta_c) = E_S(\delta_c), \quad P_x(\delta_c) = P_S(\delta_c), \quad P'_x(\delta_c) = P'_S(\delta_c), \\ P''_x(\delta_c) = P''_S(\delta_c).$$

Индексом «S» обозначены значения давления и энергии, рассчитанные (по сплайнам) на участке  $1 \leq \delta \leq \delta_c$ ; штрихом обозначены производные давления по плотности. 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 [1, 2]. 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 описать имеющиеся экспериментальные данные.

Используемая нами зависимость для  $F_p(\delta, T)$  имеет вид:

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

где  $\theta(\delta, T)$  – температура Дебая;  $D(x) = \frac{3}{x^3} \int_0^x t^3 e^{-t} dt - 1$  – функция Дебая.

Для вычисления функции Дебая  $D(x)$  применяется аппроксимация, представленная в работе [6].

Выражение для температуры Дебая выбрано в следующем виде:

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

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

$$\theta_D(\delta) = \theta_0 \exp \left( \int_1^{\delta} \frac{\Gamma_{p0}(x)}{x} dx \right), \quad \theta_0 = \theta_D(1),$$

где  $\Gamma_{p0}(\delta)$  – функция, характеризующая зависимость от плотности коэффициента Грюнайзена ядер (решетки) «холодного» вещества (при  $T \cong 0$ ).

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).  $\psi_p(\delta)$  и  $\Gamma_{p0}(\delta)$  связаны уравнением

$$\psi_p(\delta) = \psi_{p0} \delta^{-\gamma_\phi} \exp \left( 2 \int_1^{\delta} \frac{\Gamma_{p0}(\tau)}{\tau} d\tau \right), \quad (\psi_{p0} = \psi_p(1)),$$

$\gamma_\phi$  – определяет асимптотическое значение коэффициента Грюнайзена решетки при  $T \rightarrow \infty$ . Выражение (5) обеспечивает выполнение предельных переходов для изохорической теплоемкости:

$$\left( \frac{\partial E_p}{\partial T} \right)_\delta \rightarrow 0, \quad \text{при} \quad \frac{T}{\psi_p(\delta)} \rightarrow 0 \\ \text{и} \quad \left( \frac{\partial E_p}{\partial T} \right)_\delta \rightarrow \frac{C_{V0}^p}{2}, \quad \text{при} \quad \frac{T}{\psi_p(\delta)} \rightarrow \infty.$$

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

Для описания зависимости  $\Gamma_{p0}(\delta)$ , выделено два участка:  $0 \leq \delta \leq \delta_p$  и  $\delta > \delta_p$  ( $\delta_p > 1$ ). Расчет  $\Gamma_{p0}(\delta)$  в диапазоне  $0 \leq \delta \leq \delta_p$  проводится с использованием зависимости

$$\Gamma_{p0}(\delta) = A_p + \frac{(\gamma_{1p} - A_p)}{1 + (\delta/\delta_{mp})^{a_p}} + \frac{(\gamma_{2p} - A_p)}{1 + (\delta/\delta_{np})^{b_p}}. \quad (6)$$

При  $\delta \rightarrow 0$   $\Gamma_{p0}(\delta) \rightarrow \gamma_{1p}$ , при  $\delta \rightarrow \infty$   $\Gamma_{p0}(\delta) \rightarrow \gamma_{2p}$ .

Выполнение условия  $\Gamma_{p0}(\delta=1) = \gamma_{0p}$ , где  $\gamma_{0p}$  – значение коэффициента Грюнайзена при нормальных условиях, обеспечивается за счет коэффициента  $A_p$  в (6), который связан с другими параметрами зависимости следующим соотношением:

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

Параметры  $a_p, b_p, \delta_{mp}, \delta_{np}$  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  $\delta > \delta_c$ . Для расчета  $\Gamma_{p0}(\delta)$  используется следующая формула:

$$\Gamma_{p0}(\delta) = \Gamma_{\text{lim}}(\delta) Y_\Gamma(\delta),$$

где  $\Gamma_{\text{lim}}(\delta) = 0,5 + a_{\text{lim}} \delta^{-b_{\text{lim}}} + c_{\text{lim}} \delta^{-d_{\text{lim}}}$  – выражение, аппроксимирующее расчет коэффициента Грюнайзена по модели однокомпонентной плазмы (ОКП) [9, 10], а степень ионизации рассчитана по модели ТФП (см., например, [7]);  $Y_\Gamma(\delta) = 1 + (b_{1\Gamma} + b_{2\Gamma} \delta^{-\alpha_\Gamma} + b_{3\Gamma} \delta^{-2\alpha_\Gamma}) \delta^{-1}$  – интерполяционная функция.

Константы  $b_{1\Gamma}, b_{2\Gamma}$  и  $b_{3\Gamma}$  определяются из условий непрерывности функций, первых и вторых производных в точке  $\delta_p$ . Параметр  $\alpha_\Gamma$  – в выражении для  $Y_\Gamma(\delta)$  определяет скорость приближения значений  $\Gamma_{p0}(\delta)$  к значениям  $\Gamma_{\text{lim}}(\delta)$ .

Температура плавления рассчитывается с использованием модели Линдемана в форме [8]:

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

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.

Зависимость  $\Gamma_{\text{пл}}(\delta)$  задается в такой же форме, как для коэффициента Грюнайзена ядер  $\Gamma_{p0}(\delta)$  при  $T = 0$  и  $0 \leq \delta \leq \delta_p$  (6). В описываемой модели уравнения состояния, в отличие от [2], параметры зависимости  $\Gamma_{\text{пл}}(\delta)$  в (7) не связаны с параметрами, используемыми для расчета коэффициента Грюнайзена в уравнении состояния.

Подстановка функции для  $\Gamma_{\text{пл}}(\delta)$  вида (6) в (7) позволяет получить аналитическую зависимость  $T_{\text{пл}}(\delta)$  для расчета температуры плавления.

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 плотностей, где справедливы расчеты по модели ОКП (см., например [9, 10]). 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 от плотности и температуры задается следующими выражениями:

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

где  $C_{V0}^e = 3R/2A$  – изохорная теплоемкость электронов в одном грамме 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 ( $\beta_0$  – коэффициент элек-

тронной теплоемкости);  $y(\delta, T) = Z - [Z - y_0(\delta)] \times [g_1(T)(1 - \zeta(\delta)) + g_2(T, \delta)\zeta(\delta)]$  – функция, эффективно учитывающая изменение среднего числа свободных электронов на 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  $\delta = 0$ ,  $\delta \rightarrow \infty$  соответственно.

Функции  $g_1(T)$ ,  $g_2(T, \delta)$  и  $\zeta(\delta)$  определяются соотношениями:

$$g_1(T) = \exp\left[-\left(\frac{T}{\Psi_1}\right)^{\alpha_1}\right],$$

$$g_2(T, \delta) = \frac{1}{1 + \left[\frac{T}{(\Psi_2(1 + a_\Psi \delta^{b_\Psi}))}\right]^{\alpha_2}},$$

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

Функция  $F_e(\delta, T)$  (8) содержит 14 подгоночных параметров ( $\beta_0, \Psi_1, \Psi_2, a_\Psi, b_\Psi, \alpha_1, \alpha_2, a_\zeta, b_\zeta, Z_a, Z_b, a_e, \delta_{ne}$ ), из них 13 – параметры функции  $y(\delta, T)$ .

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

$$\left. \begin{aligned} F_e(\delta, T) &\rightarrow -\frac{\beta_0 T^2}{2\delta^{-2/3}} [y_0(\delta)]^{1/3} \\ y(\delta, T) &\rightarrow y_0(\delta) \\ \left(\frac{\partial E_e}{\partial T}\right)_\delta &\rightarrow \frac{\beta_0 T}{\delta^{-2/3}} [y_0(\delta)]^{1/3} \end{aligned} \right\} \text{при } T \rightarrow 0,$$

$$\left. \begin{aligned} F_e(\delta, T) &\rightarrow -C_{V0}^e Z T \ln\left(\frac{\beta_0 T}{2C_{V0}^e} [Z\delta]^{-2/3}\right) \\ y(\delta, T) &\rightarrow Z \\ \left(\frac{\partial E_e}{\partial T}\right)_\delta &\rightarrow Z C_{V0}^e \end{aligned} \right\} \text{при } T \rightarrow \infty.$$

Таким образом, при низких температурах асимптотикой для электронной составляющей является первая температурная поправка для вырожденного электронного газа, в которой  $F_e(\delta, T) \sim T^2$  [11].

При высоких температурах, выполняются асимптотики для полностью ионизованного, описываемого

статистикой Больцмана, идеального газа с числом электронов  $Z$  на один атом [11].

Функция  $\zeta(\delta)$  входящая в состав  $y(\delta, T)$  задает вес функций  $g_1(T)$  и  $g_2(T, \delta)$  в определении  $y(\delta, T)$  на изохорах. Ограничением на  $\zeta(\delta)$  служит условие  $0 \leq \zeta(\delta) \leq 1$ . Для этого достаточно, чтобы  $a_\zeta \geq 1$ .

Выражения для  $g_1(T)$  и  $g_2(T, \delta)$  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  $g_1(T) \rightarrow 0$ ,  $g_2(T, \delta) \rightarrow 0$  и, как следствие,  $y(\delta, T) \rightarrow Z$ . На параметры этих функций накладываются следующие ограничения:  $\Psi_1, a_\Psi, b_\Psi, \alpha_1, \Psi_2, \alpha_2 > 0$ .

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

**Уравнение состояния вольфрама.** С использованием описанной модели разработано уравнение состояния  $W$ .

На рис. 1–8 продемонстрировано описание расчетами по УРС данной работы экспериментальных данных, расчетов по модели ТФПК (модель ТФП [5] с учетом вклада ядер по модели ОКП [14]) и расчетов выполненных методом функционала плотности (МФП).

В представленном уравнении состояния вольфрама в точке кипения и критической точке значения давления, плотности и температура следующие:  $T_{\text{кип}} = 5960$  К,  $\rho_{\text{кип}} = 16$  г/см<sup>3</sup>,  $\rho_{\text{кр}} = 4,54$  г/см<sup>3</sup>,  $T_{\text{кр}} = 16140$  К,  $P_{\text{кр}} = 1,1$  ГПа. Эти значения согласуются с данными приведенными в разных источниках [22–29]. Представленные на рисунках результаты показывают, что разработанное уравнение состояния вольфрама, одновременно описывает большинство экспериментальных данных для этого вещества и удовлетворительно согласующееся с расчетами по модели ТФПК в области сверхвысоких давлений и температур.

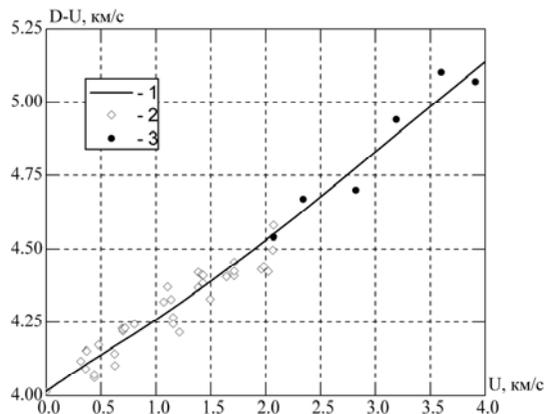


Рис. 1. Зависимость разности скорости фронта ударной волны и массовой скорости от массовой скорости от сплошного вольфрама ( $\rho_0 = 19,25$  г/см<sup>3</sup>): 1 – расчет по УРС данной работы. Эксперимент: 2 – [12], 3 – [13]

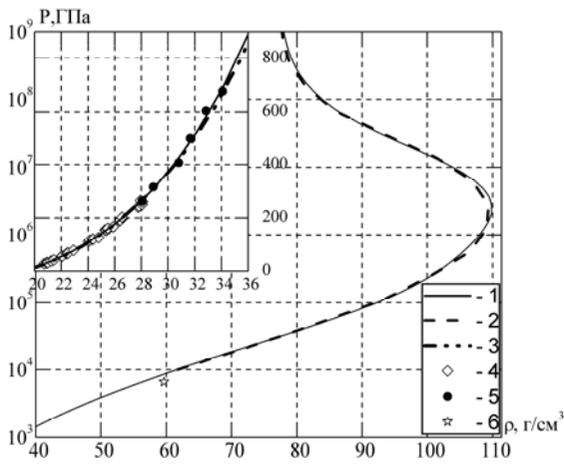


Рис. 2. Зависимость давления от плотности на ударной адиабате сплошного вольфрама ( $\rho_0 = 19,25 \text{ г/см}^3$ ): 1 – расчет по УРС данной работы; 2 – ТФПК [5,14]; 3 – МФП [16]. Эксперимент: 4 – [12], 5 – [13], 6 – [15]

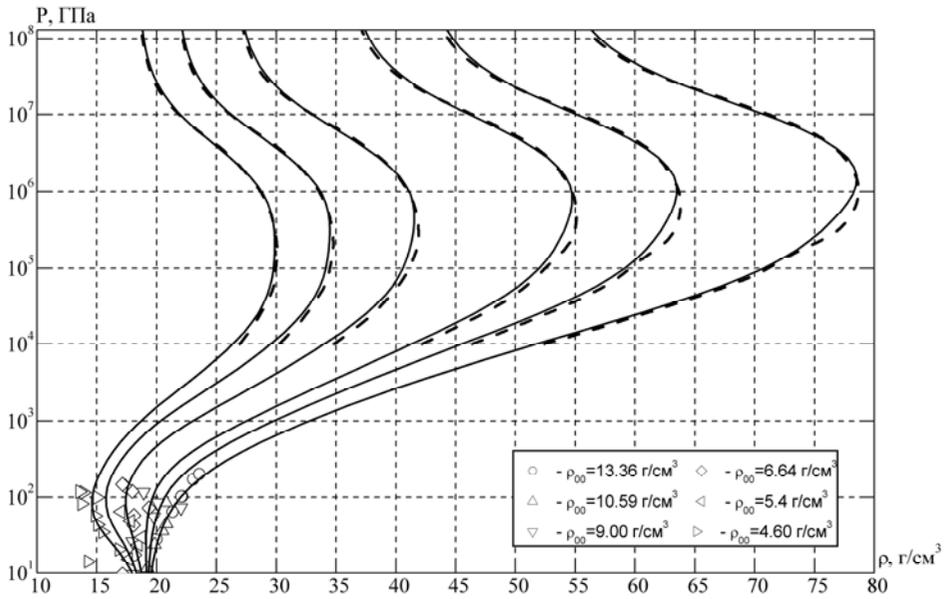


Рис. 3. Зависимость давления от плотности на ударных адиабатах пористого вольфрама: сплошные линии – расчет по УРС данной работы; пунктирные – ТФПК [5, 14]; маркеры – эксперимент [19, 20, 21]

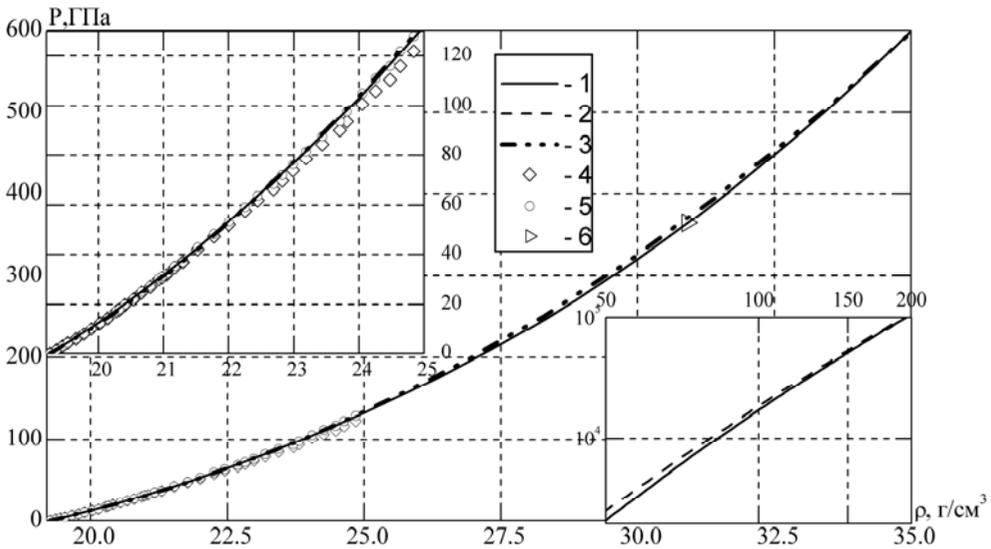


Рис. 4. Зависимости давления от плотности на изотерме  $T = 293 \text{ К}$ : 1 – расчет по УРС данной работы; 2 – ТФПК [5, 14]; 3 – МФП [16]. Эксперимент: 4, 5 – [17]; 6 – [18]

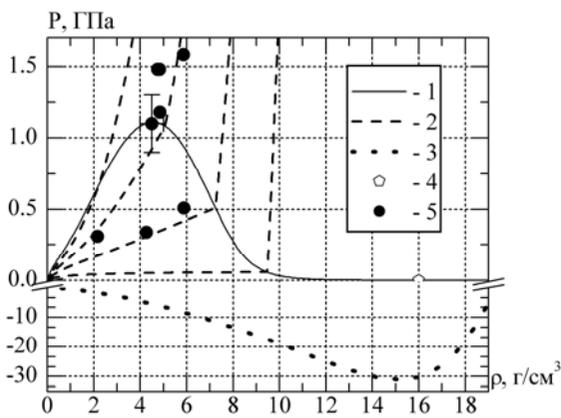


Рис. 5. Зависимости от плотности потенциального и полного давления на границе двухфазной области жидкость-пар, на изэнтропах, проходящих через двухфазную область. Расчет по УРС данной работы: 1 – граница двухфазной области; 2 – изэнтропы расширения; 3 – потенциальное давление; 4 – точка кипения; 5 – данные разных авторов по оценке положения критической точки вольфрама [22–29]

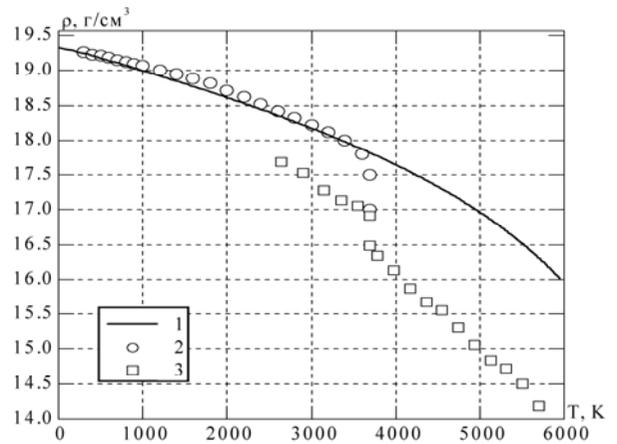


Рис. 8. Зависимость плотности вольфрама от температуры при нормальном давлении: 1 – по УРС данной работы; эксперимент: 2 – [34]; 3 – [35]

## Литература

1. Гордеев Д. Г., Гударенко Л. Ф., Жернокле- тов М. В., Куделькин В. Г., Мочалов М. А. Полуэм- пирическое уравнение состояния металлов. Уравне- ние состояния алюминия // Физика горения и взрыва. 2008. Т. 44, № 2. С. 61–75.

2. Гордеев Д. Г., Гударенко Л. Ф., Жернокле- тов М. В., Куделькин В. Г., Мочалов М. А. Полуэм- пирическая модель уравнения состояния металлов РОСА-М. Уравнение состояния алюминия // Вопро- сы атомной науки и техники. Сер: Теоретическая и прикладная физика. 2005. Вып. 3. С. 24–36.

3. Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошничен- ко В. К. Методы сплайн-функций. М.: Наука, 1980.

4. Kerley G. I. User's Manual for PANDA: A Com- puter Code for Calculating Equations of State, Los Ala- mos National Laboratory report LA-8833-M (November 1981).

5. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Таблицы тер- модинамических функций вещества при высокой концентрации энергии: Препринт № 35. М.: ИПМ АН СССР, 1975.

6. Гордеев Д. Г., Ломайкин А. И. Аппроксима- ция функции Дебая  $D_3(x)$  в области  $0 \leq x < \infty$  функ- цией класса  $C^2$  // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Математическое моделирование физических процессов. 2008. Вып. 1. С. 42–50.

7. Hitose Nagara, Tuto Nakamura. Theory of lat- tice-dynamical properties of compressed solids / Phys. Rev. B. 1985. Vol. 31, N 4. P. 1844–1855.

8. Grover Richard. Liquid Metal Equation of State Based on Scaling // Chemical Physics. 1971. Vol. 55, N 7. P. 3435–3441.

9. Hansen J. P. Statistical Mechanics of Dense Ion- ized Matter. I. Equilibrium Properties of the Classical One-component Plasma // Phys. Rev. A. 1973. Vol. 8, N 6. P. 3096–3109.

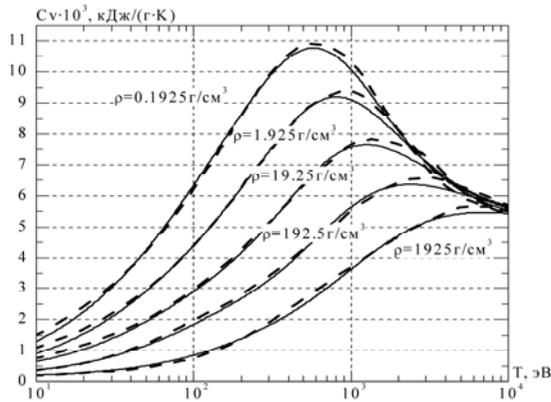


Рис. 6. Зависимости удельной изохорной теплоемкости вольфрама от температуры вдоль изохор. Расчет: сплошные линии – по УРС данной работы; пунктирные – ТФПК [5, 14]

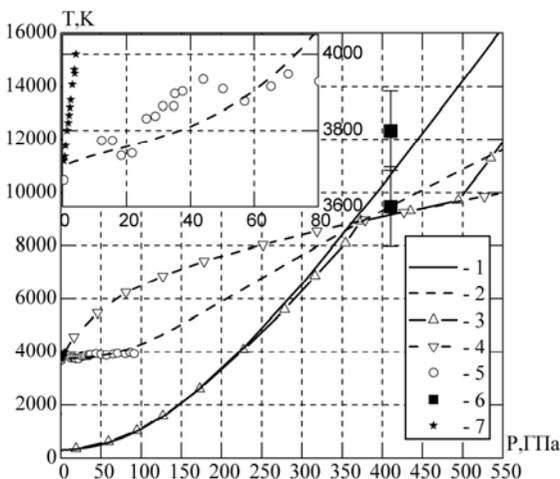


Рис. 7. Зависимость температуры от давления на ударной адиабате и на линии плавления. Расчет на линии плавления: 2 – по УРС данной работы; 4 – УРС работы [30]. Расчет на ударной адиабате: 1 – по УРС данной работы; 3 – УРС работы [30]. Эксперимент на линии плавления: 5 – [31]; 6 – [32]; 7 – [33]

10. Pollock E. L., Hansen J. P. Statistical Mechanics of Dense Ionized Matter. II. Equilibrium Properties and Melting Transition of the Crystallized One-component Plasma // *Phys. Rev. A*. 1973. Vol. 8, N 6. P. 3110–3122.
11. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука. 1966.
12. LASL Shock Hugoniot Data // Ed. Marsh S. P., Berkley: Univ. of California Press, 1980.
13. Hixson R. S., Fritz J. N., Deeney C., Asay J. R. Shock compression of tungsten and molybdenum // *J. Appl. Phys.* 1992. Vol. 71, N 4. P. 1721.
14. Копышев В. П. О термодинамике ядер одноатомного вещества: Препринт № 59. 1978. М.: ИПМ АН СССР.
15. Ragan III C. E. Shock compression measurements at 1 to 7 TPa // *Phys. Rev. Ser. A*. 1982. Vol. 25, N 6. P. 3360–3375.
16. Wang Yi, Chen D., Zhang X. Calculated Equation of State of Al, Cu, Ta, Mo, and W to 1000 GPa // *Phys. Rev. L* 2000. Vol. 84. P. 3220.
17. Dewaele A., Loubeyre P., Mezouar M. Equations of state of six metals above 94 GPa // *Phys. Rev. B*. 2004. Vol. 70. P. 094112.
18. 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. Vol. 61, N 12. P. 3830.
19. 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. Трунина Р. Ф. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2006.
20. Boade R. R. Dynamic Compression of Porous Tungsten // *Journal of applied physics*. August 1969. Vol. 40, N 9. P. 3781–3785.
21. Dattatraya P. Dandekar and Roger M. Lamothe. Behavior of porous tungsten under shock compression at room temperature // *Journal of Applied Physics*. 1977. Vol. 48, N 7. P. 2871–2879.
22. Roland W. Ohse, Hilmar von Tippelskirch. The critical constants of the elements and of some refractory materials with high critical temperatures // (A review). *High Temperatures-High Pressures*, 1977, Vol. 9. P. 367–385.
23. Фортвов В. Е., Дремин А. Н., Леонтьев А. А. Оценка параметров критической точки // *Теплофизика высоких температур*. 1975. Т. 13, № 5. С. 1072–1080.
24. Ломоносов И. В. Фазовые диаграммы и термодинамические свойства металлов при высоких давлениях и температурах. Дис. ... док. ф. м. наук Черногловка.
25. Seydel U., Bauhof H., Fucke W., Wadle H. Thermophysical data for various transition metals at high temperatures obtained by a submicrosecond-pulse-heating method. *High Temp. – High Press.* 1979. Vol. 11, N 6. P. 635–642.
26. Fucke U., Seydel W. Improved experimental determination of critical point data for tungsten // *High Temp. – High Press.* 1980. Vol. 12, N 4. P. 419–432.
27. 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. Vol. 44, N 2. P. 95.
28. Alder B., Young D. Critical point of metals from the van der Waals model // *Phys. Rev. Ser. A*. 1971. Vol. 3, N 1. P. 364–371.
29. Rakhel A. D., Kloss A., Hess H. On the Critical Point of Tungsten // *International Journal of Thermophysics*. 2002. Vol. 23, N 5. P. 1369.
30. Kerley G. I. Equations of State for Be, Ni, W, and AU, Sandia report SAND 2003-3784 (October 2003).
31. Errandonea D., Schwager B., Ditz R., Gessmann C., Boehler R., Ross M. Systematics of transition-metal melting // *Phys. Rev. B*. 2001. Vol. 63. P. 132104.
32. Feng Xi, Lingcang Cai. Theoretical study of melting curves on Ta, Mo, and W at high pressures // *Physica B*. 2008. Vol. 403. P. 2065.
33. Kloss A., Hess H., Schneidenbach H., Grossjohann R. // Scanning the Melting Curve of Tungsten by a Submicrosecond Wire-Explosion Experiment // *International Journal of Thermophysics*. 2002. Vol. 20, N 4. P. 1999.
34. Зиновьев В. Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. М.: Metallurgia, 1989.
35. Hixson R. S., Winkler M. A. Thermophysical Properties of Solid and Liquid Tungsten // *International Journal of Thermophysics*. 1990. Vol. 11, N 4. P. 709.