

УДК 532.593

ОБ ИСПАРЕНИИ ЖЕЛЕЗА ПОСЛЕ УДАРНОГО СЖАТИЯ

А. Б. Медведев

РФЯЦ, ВНИИ экспериментальной физики, 607188 Саров, postmaster@ifv.vniief.ru

Разработанное ранее широкодиапазонное многофазное уравнение состояния Fe использовано для расчета ударного давления, вызывающего его испарение при изоэнтروпической разгрузке до 10^{-4} ГПа (1 атм). Расчеты выполнены для трех начальных состояний вещества: давление 1 атм и температура 298 К («холодное» исходное состояние), 1 ГПа и 1500 К («теплое» состояние), 40 ГПа и 4000 К («горячее» состояние). Ударное давление составляет 359, 261, 132 ГПа соответственно. Эти значения в целом меньше оценок других авторов. Приведены аргументы в их обоснование.

Ключевые слова: железо, уравнение состояния, давление, температура, плотность, энтропия, ударное сжатие, изоэнтропическая разгрузка, испарение, скорость, соударение, Земля.

DOI 10.15372/FGV20220609

Высокоэнергетическое воздействие (механический удар, лазерный нагрев и др.) на вещество сопровождается процессами ударно-волнового сжатия и последующей изоэнтропической разгрузки. В случае разгрузки до низкого давления может произойти испарение вещества. Обычно при определении способности вещества к испарению после ударного воздействия рассматривается изоэнтропическая разгрузка до давления $P = 1$ атм $= 1.01325 \cdot 10^{-4}$ ГПа. При $P = 1$ атм жидкость в точке кипения (начало испарения) имеет температуру T_1 , плотность ρ_1 , энтропию S_1 .

Значение ударного давления, приводящего к испарению при разгрузке, представляет интерес для различных материалов. Для железа знание этой характеристики важно по причине его широкого использования в качестве конструкционного материала в технике и обилия его содержания в планетах земной группы. В частности, значение ударного давления сильно влияет на результат моделирования процесса формирования Земли из планетезималей при их столкновении друг с другом [1, 2].

Вызывающее испарение ударное давление зависит от начального (до ударного воздействия) состояния вещества, определяемого параметрами P_0 , T_0 . В последующем для Fe рассматриваются три набора начальных параметров: $P_0 = 1$ атм, $T_0 = 298$ К (далее такое состояние называется исходно «холодным»), $P_0 = 1$ ГПа, $T_0 = 1500$ К (исходно «теплое» состояние), $P_0 = 40$ ГПа, $T_0 = 4000$ К (исходно «го-

рячее» состояние). Холодное состояние представляет интерес при решении различных технических задач. Теплое состояние обычно рассматривается при моделировании столкновения планетезималей сравнительно малых размеров, горячее состояние — больших (примерно размера Марса) (см. [1, 2] и библиографию в них).

Вдоль определенной (отвечающей начальным параметрам вещества P_0 , T_0) ударной адиабаты значения T , ρ , S возрастают с увеличением P [3]. Вдоль изоэнтропы разгрузки, исходящей из состояния на ударной адиабате, характеризуемого фиксированным ударным давлением P , энтропия постоянна ($S = \text{const}$), а величины T и ρ уменьшаются (для T это имеет место при положительном коэффициенте расширения вещества; далее рассматривается только такой случай) по мере уменьшения давления. В случае изоэнтропы, характеризуемой $S = S_1 = \text{const}$, при реализации на ней давления $P = 1$ атм выполняются условия $T = T_1$, $\rho = \rho_1$, соответствующие кипению жидкости при 1 атм. С учетом этого значение ударного давления, отвечающее началу испарения вещества при изоэнтропической разгрузке до $P = 1$ атм, может быть определено из условия $S(P) = S_1$ (условие достижения вдоль возрастающей ударной зависимости $S(P)$ значения энтропии кипения $S_1 = S(T_1, P = 1 \text{ атм})$) или путем поиска (экспериментально или расчетно) изоэнтропы разгрузки, вдоль которой при $P = 1$ атм выполняется условие $T = T_1$ (или, что равносильно, условие $\rho = \rho_1$, так как $\rho_1 = \rho(T_1, P = 1 \text{ атм})$). Оба способа эквива-

лентны. Чем сильнее вдоль ударной адиабаты выполняется неравенство $S(P) > S_1$, тем больше образуется пара при разгрузке до 1 атм [3].

Экспериментальные характеристики кипения жидкого Fe при $P = 1$ атм составляют $T_1 = 3133 \pm 70$ К [4], $\rho_1 = 6.2 \pm 0.3$ г/см³ [5–7] $S_1 = 2.24 \pm 0.06$ Дж/(г·К) [4]. Последнее значение получено с привлечением третьего начала термодинамики.

Используемые на практике модельные полуэмпирические уравнения состояния (УРС) Fe и других веществ обычно конструируются так, чтобы расчетные значения T_1 , ρ_1 при $P = 1$ атм соответствовали экспериментальным данным (хотя это не всегда удается реализовать). Полумпирические УРС, направленные на описание сравнительно высоких температур (выше температуры Дебая), могут не удовлетворять третьему началу термодинамики. Для них соответствие модельного значения S_1 экспериментальному не обязательно (оно не мешает в области применимости таких УРС проводить на их основе расчет соответствующего испарению ударного давления с использованием модельных характеристик S_1 или T_1 , ρ_1). Значения вызывающего испарение при разгрузке ударного давления P , соответствующие различным УРС, могут значительно различаться между собой даже в случае, когда эти УРС показывают значения T_1 , ρ_1 , близкие между собой и воспроизводящие полученные в экспериментах. Причиной этого является различие значений коэффициента Грюнайзена, теплоемкости и др. в модельных УРС при высоких параметрах P , T (в условиях ударного сжатия), а также различие термодинамических характеристик, в частности начальной плотности ρ_0 , в начальном состоянии с параметрами P_0 , T_0 .

Имеющиеся оценки ударного давления, приводящего к испарению Fe при изэнтропической разгрузке до 1 атм, значительно различаются между собой.

В [8] на основе используемого авторами модельного УРС Fe из условия $S(P) = 2.24$ Дж/(г·К) получено, что испарение исходно холодного Fe начинается при $P = 887$ ГПа. По данным [9, 1] можно определить значение ударного давления P , вызывающего испарение холодного Fe, отвечающего УРС Fe [9]. Согласно этому УРС в точке кипения при $P = 1$ атм значения $T_1 = 3190$ К, $S_1 = 2.47$ Дж/(г·К) [9]. В [1] приведена зависимость $S(P)$ вдоль ударной адиабаты исходно холодного Fe, соответ-

ствующая УРС [9]. Она определяется формулой

$$S(P) = -19.840P^{-0.5} + 0.0399P^{0.5} - 0.0001047P + 2.4507 \quad (1)$$

(S — [Дж/(г·К)], P — [ГПа]). С помощью (1) из условия $S(P) = 2.47$ Дж/(г·К) можно вычислить, что испарение исходно холодного Fe согласно УРС [9] вызывает ударное давление $P = 540$ ГПа. В [1] выполнены эксперименты по ударному сжатию холодного Fe, его последующей разгрузке и ударно-волновому воздействию испаренного вещества на преграды различной динамической жесткости. На основе измерения скоростей ударных волн и разлета испаренного Fe, данных по ударному сжатию пористого Fe и экспериментального значения плотности жидкого Fe в точке кипения при $P = 1$ атм (использовано значение $\rho_1 = 6.0$ г/см³) в [1] получено, что испарение исходно холодного вещества при разгрузке начинается при ударном давлении $P = 507$ (+65, –85) ГПа. Для расчета зависимости $S(P)$ вдоль ударной адиабаты холодного Fe в [1] рекомендовано использовать функцию (1) с вычетом из нее величины 0.1717 Дж/(г·К), что при $P = 507$ ГПа дает $S(P) = 2.24$ Дж/(г·К).

Согласно [1] зависимость $S(P)$ вдоль ударной адиабаты исходно теплого Fe, соответствующая УРС Fe [9], определяется выражением

$$S(P) = -12.570P^{-0.5} + 0.04524P^{0.5} - 0.0001321P + 2.2097 \quad (2)$$

(S — [Дж/(г·К)], P — [ГПа]). С учетом (2) из условия $S(P) = 2.47$ Дж/(г·К) следует, что согласно УРС [9] испарение теплого Fe вызывает ударное давление $P = 420$ ГПа. В [1] вдоль ударной адиабаты теплого Fe рекомендовано применять зависимость $S(P)$ (2), уменьшенную на величину 0.1717 Дж/(г·К) (по аналогии с холодным Fe). В этом случае из условия $S(P) = 2.24$ Дж/(г·К) следует, что согласно [1] к испарению теплого Fe при разгрузке до 1 атм приводит ударное давление $P = 387$ ГПа.

В [2] рассчитано модельное УРС жидкого Fe с помощью метода молекулярной динамики. На основе этого УРС определены значения ударного давления, отвечающие испарению после ударного сжатия исходно теплого и горячего Fe. Из условия $S(P) = 2.36$ Дж/(г·К) в [2] получено, что в первом случае $P = 312$ ГПа, во втором — $P = 365$ ГПа.

Вышеприведенные значения вызывающего испарение при разгрузке ударного давления заметно различаются между собой (887, 540, 507 ГПа для первоначально холодного Fe и 420, 387, 312 ГПа для теплого Fe).

В настоящей работе выполнены расчеты значений ударного давления P для трех названных выше начальных состояний с помощью многофазного УРС Fe [10]. В нем отражены четыре твердые фазы (α , γ , δ , ε), жидкость (l) и пар. Как показано в [10], расчет по этому УРС, как правило, в пределах погрешности измерений согласуется с экспериментальными данными по низкотемпературному изотермическому сжатию твердого вещества, ударному сжатию сплошных (начальная плотность близка к кристаллической) и пористых образцов исходной α -фазы, ударному сжатию γ -фазы, скорости звука вдоль основной ударной адиабаты, изоэнтропической разгрузке, плавлению при ударном сжатии, с данными на изобаре при $P = 1$ атм, в том числе по испарению, и др. Некоторые дополнительные сравнения с экспериментом выполнены в настоящей работе.

Согласно УРС Fe [10] при $P = 1$ атм в точке кипения $T_1 = 3130$ К, $\rho_1 = 6.35$ г/см³, $S_1 = 2.23$ Дж/(г·К). Эти значения соответствуют вышеприведенным экспериментальным. Модельные характеристики были получены в результате расчета кривой равновесия жидкость — пар (см. далее рис. 7) с привлечением правила площадей Максвелла.

Вычисленные на основе УРС [10] в исходно холодном, теплом и горячем состоянии значения начальной плотности ρ_0 равны 7.86, 7.59, 8.43 г/см³, энтропии S_0 — соответственно 0.52, 1.50, 2.19 Дж/(г·К). В первом случае Fe находится в α -фазе, во втором — в γ -фазе, в третьем — в жидкой. В случае холодного и теплого вещества модельные значения ρ_0 хорошо согласуются [10] с экспериментом, для горячего Fe они требуют контроля. В [11] выполнены измерения плотности l -Fe при $T = 2600 \div 3060$ К (среднее значение $T = 2830$ К), $T = 3250 \div 3630$ К (среднее $T = 3440$ К) и $T = 4250 \div 4350$ К (среднее $T = 4300$ К). Эти данные и расчетная плотность по УРС [10] вдоль изотерм показаны на рис. 1. Расчет довольно хорошо воспроизводит эксперимент. На рис. 1 также даны значения ρ на изотерме $T = 4000$ К при давлениях 40 и 130 ГПа согласно УРС l -Fe [2] (со-

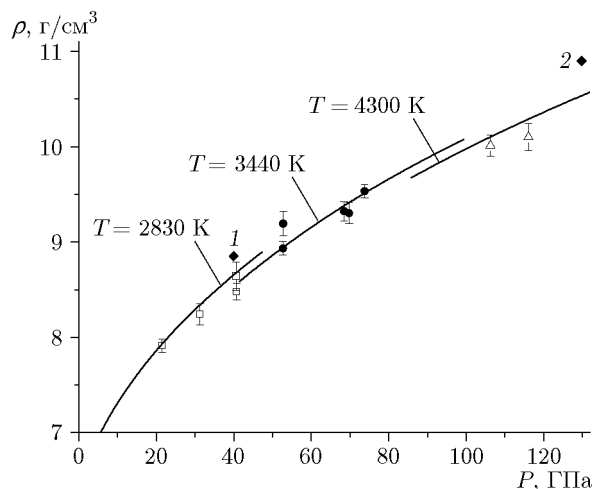


Рис. 1. Зависимость плотности от давления вдоль изотерм жидкого Fe:

эксперимент [11]: квадраты — $T = 2600 \div 3060$ К (среднее значение $T = 2830$ К), кружки — $T = 3250 \div 3630$ К (среднее $T = 3440$ К), треугольники — $T = 4250 \div 4350$ К (среднее $T = 4300$ К); линии — расчетные по УРС [10] изотермы $T = 2830, 3440, 4300$ К; ромбы — расчет по УРС [2] при $T = 4000$ К: 1 — 40 ГПа, 2 — 130 ГПа

стояния 1 и 2). При $P = 40$ ГПа, $T = 4000$ К значение ρ согласно [2] превышает экспериментальное значение [11], отвечающее параметрам $P = 40$ ГПа, $T = 2830$ К. То есть для исходно горячего Fe ($P_0 = 40$ ГПа, $T_0 = 4000$ К) УРС [2] завышает ρ_0 (на $\approx 5\%$). Как видно из рис. 1, модельное значение ρ [2] завышено также в состоянии 2. Можно отметить, что УРС [10], аналогично плотности, хорошо воспроизводит измеренную в [11] скорость звука $c = \sqrt{(\partial P / \partial \rho)_S}$ вдоль изотерм $T = 2700$ К (описание практически точное) и $T = 2200$ К (расчетное значение c меньше экспериментального на $\approx 3\%$).

Отвечающие трем вышеназванным случаям ударные адиабаты Fe, рассчитанные с помощью УРС [10], показаны на рис. 2 в координатах P, ρ (адиабаты отвечают l -фазе). Там же представлены экспериментальные данные [12, 13] по ударному сжатию исходно холодного Fe и ударные адиабаты по УРС [2] для теплого и горячего Fe. Из рис. 2 видно, что расчет на основе УРС [10] для исходно холодного Fe хорошо согласуется с экспериментом. Аналогичное соответствие с этими данными наблюдается в случае УРС [9]. Вдоль ударных зависимостей для теплого и горячего вещества рассчитанная по УРС [2] плотность больше, чем вдоль аналогичных кривых по УРС [10]. Для горячего Fe

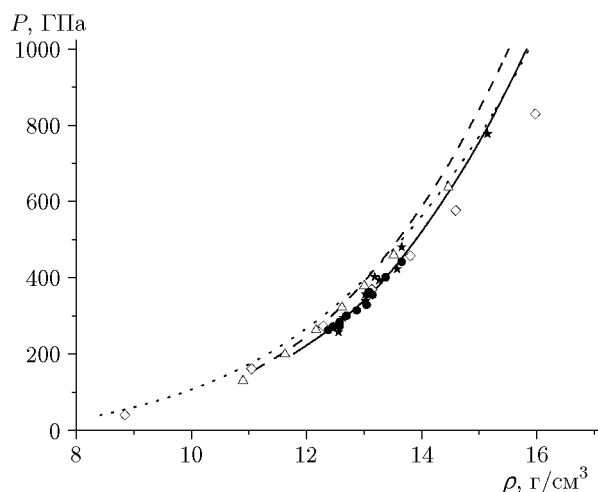


Рис. 2. Зависимость давления от плотности при ударном сжатии исходно холодного, теплого и горячего Fe:

эксперимент для холодного Fe: кружки — [12], звездочки — [13]; расчет: треугольники и ромбы — ударные адиабаты по УРС [2] для теплого и горячего Fe соответственно; сплошная, штриховая и пунктирная линии — ударные адиабаты по УРС [10] для холодного, теплого и горячего Fe соответственно; вдоль ударных адиабат Fe находится в l -фазе

отчасти это связано с более высокой начальной плотностью $\rho_0 = 8.85 \text{ г/см}^3$ в [2] по сравнению с $\rho_0 = 8.43 \text{ г/см}^3$ в [10]. Расчетная ударная адиабата холодного Fe в [2] не приведена. Ударные зависимости для теплого и горячего Fe согласно УРС [9] здесь неизвестны.

На основе УРС [10] были рассчитаны зависимости $S(P)$ вдоль ударных адиабат, показанных на рис. 2. На рис. 3 они даны для исходно холодного и горячего Fe. Там же представлены зависимости $S(P)$ по [1] для холодного Fe и по [2] для горячего. Из условия $S(P) = S_1 = 2.23 \text{ Дж/(г} \cdot \text{К)}$ получено, что согласно УРС Fe [10] началу испарения при изэнтропической разгрузке до 1 атм в трех вышеназванных случаях соответствуют значения $P = 359, 261, 132 \text{ ГПа}$. Для исходно холодного Fe рассчитанное значение P значительно меньше результатов расчета по [8] (887 ГПа), [9] (540 ГПа) и [1] (507 ГПа). Для теплого Fe оно ощутимо меньше данных [9] (420 ГПа) и [1] (387 ГПа) и несколько (на $\approx 20\%$) меньше результата [2] (312 ГПа). В случае горячего Fe полученное здесь значение отличается от [2] (365 ГПа) почти в три раза.

На более низкое ударное давление P по сравнению с результатами [9, 1] (и тем бо-

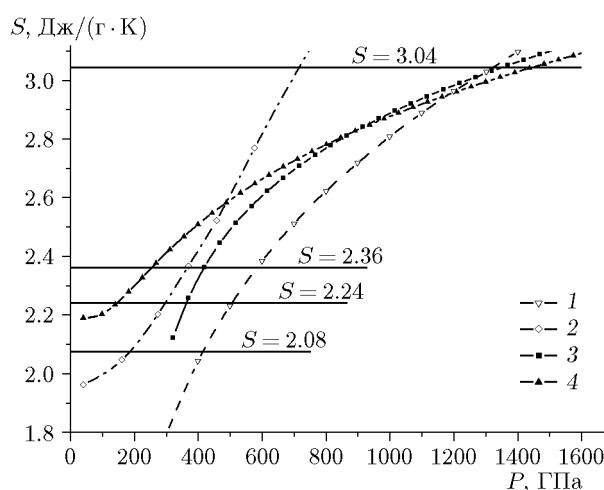


Рис. 3. Расчетные зависимости энтропии от давления при ударном сжатии исходно холодного и горячего Fe:

1 — холодное Fe по [1], 2 — горячее Fe по [2], 3 — холодное Fe по [10], 4 — горячее Fe по [10]

лее [8]) для исходно холодного Fe указывают данные, приведенные на рис. 4. На нем показана линия плавления (и другие фазовые границы) ϵ -фазы Fe согласно УРС [10]. Можно отметить, что при $P > 100 \text{ ГПа}$ она хорошо согласуется с изображенной на рис. 4 экспериментальной линией плавления [14] (в этой работе измерения выполнены до 290 ГПа и экстраполированы до более высоких давлений) и проходит ниже (в интервале $\approx 100 \div 300 \text{ ГПа}$ примерно на 800 К) линии плавления [15] (эксперимент выполнен до $\approx 200 \text{ ГПа}$, выше проведена экстраполяция; результаты [15] на рис. 4 не показаны). На рис. 4 приведены температуры вдоль ударной адиабаты исходно холодного Fe, полученные в экспериментах [16] (при 380 и 420 ГПа) и [17] (при 495 ГПа). Эти данные, судя по положению линии плавления ϵ -фазы Fe, относятся к заведомо жидкому состоянию. На рисунке дано их описание модельными зависимостями $T(P)$ согласно УРС [9] (данные взяты из [17]) и УРС [10]. УРС [10] по сравнению с УРС [9] несколько лучше описывает данные по ударным параметрам T, P [16, 17] в интервале $P \approx 400 \div 500 \text{ ГПа}$. На рис. 4 также представлены данные [16] по температуре при изэнтропической разгрузке до $P \approx 1 \div 10 \text{ ГПа}$ после ударного сжатия исходно холодного Fe (при определении температуры T в [16] привлекались газодинамические расчеты). В [16] четко не указано, из какого ударного давления, 420 или 380 ГПа, в экспериментах выпол-

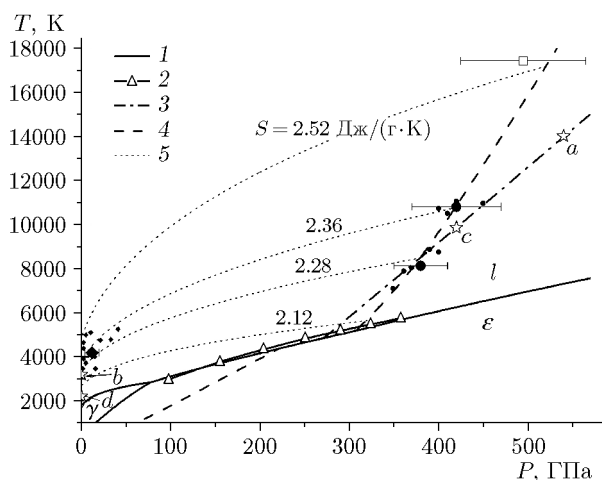


Рис. 4. Зависимость температуры от давления вдоль линий фазового равновесия, ударной адиабаты и изоэнтроп разгрузки Fe:

1 — линии равновесия фаз γ , ϵ , l по УРС [10]; 2 — экспериментальная линия плавления [14]; 3, 4 — расчетные зависимости вдоль ударной адиабаты исходно холодного Fe по УРС [9] и [10] соответственно; 5 — расчетные по УРС [10] изоэнтропы разгрузки с исходным ударным давлением 320, 380, 420 и 520 ГПа; маленькие кружки — температура ударно-сжатого Fe в отдельных экспериментах [16], большие — средние значения температуры [16]; квадрат — экспериментальная температура ударно-сжатого Fe [17]; маленькие и большой ромбы — температура в отдельных опытах по изоэнтропической разгрузке и ее осредненное значение [16]

нялась изоэнтропическая разгрузка. Далее как основной вариант рассматривается разгрузка из 420 ГПа. Обсуждается также случай разгрузки из 380 ГПа. На рис. 4 показаны четыре изоэнтропы разгрузки, рассчитанные по УРС [10] из состояний с $P = 320, 380, 420, 520$ ГПа (им отвечает $S = 2.12, 2.28, 2.36, 2.52$ Дж/(г·К)). Температура разгруженного l -Fe при определенном конечном значении P (например, 1 ГПа) уменьшается по мере уменьшения исходного для разгрузки ударного давления P . Аналогично поведение данной характеристики в других УРС и в реальности (причин для иного поведения нет). Температура (среднее значение $T \approx 4000$ К) [16], полученная при разгрузке из состояния с $P = 420$ ГПа, показывает, что более низкая по сравнению с $T = 4000$ К температура кипения T_1 (3190 К по [9] или 3133 К по [1]) при разгрузке будет реализована при более низком ударном давлении, $P < 420$ ГПа (так как чем меньше конечная температура при разгрузке, тем мень-

ше исходное ударное давление). Однако согласно [9] значение $T_1 = 3190$ К (звездочка b на рис. 4) реализуется при разгрузке из состояния $P = 540$ ГПа (звездочка a на рис. 4), а согласно [1] значение $T_1 = 3133$ К реализуется при $P = 507$ ГПа. То есть в обоих случаях значение T_1 достигается при $P > 420$ ГПа. Это указывает на то, что значения ударного давления, вызывающего испарение при разгрузке до $P = 1$ атм, в подходах [9, 1] являются завышенными. В связи с этим можно отметить, что по оценке (с использованием температуры на показанных на рис. 4 изоэнтропах $S = 2.12 \div 2.52$ Дж/(г·К)) согласно УРС [9] при разгрузке из состояния 420 ГПа (звездочка c на рис. 4) до 1 атм температура составляет чуть больше 2000 К (звездочка d на рис. 4), что не согласуется с $T \approx 4000$ К [16].

Если конечное значение $T \approx 4000$ К при изоэнтропической разгрузке в [16] было реализовано при исходном ударном давлении $P = 380$ ГПа, то температура кипения T_1 (< 4000 К) достигается при $P < 380$ ГПа. Это ограничение для вызывающего испарение ударного давления является более жестким по сравнению с условием $P < 420$ ГПа.

Ударное давление $P = 359$ ГПа, вызывающее испарение при разгрузке до 1 атм исходно холодного Fe согласно УРС [10], согласуется с выводом на основе данных [16], что эта характеристика должна быть меньше 420 (380) ГПа. УРС [10] достаточно корректно описывает конечное значение $T \approx 4000$ К [16] в случае разгрузки из состояния 420 ГПа (см. изоэнтропу $S = 2.36$ Дж/(г·К) на рис. 4). Это дает основание считать, что это УРС в целом верно предсказывает также значение $T = 3130$ К (температура кипения T_1) при разгрузке из состояния с $P = 359$ ГПа. Данные [16] по конечной температуре разгруженного Fe в пределах их разброса могут быть воспроизведены УРС [10] при изменении исходного давления от 380 ГПа (изоэнтропа $S = 2.28$ Дж/(г·К) на рис. 4) до 460 ГПа (отвечающая данному давлению изоэнтропа проходит примерно посередине между изоэнтропами $S = 2.36$ и 2.52 Дж/(г·К) на рис. 4). С учетом этого ориентировочная погрешность оценки ударного давления $P = 359$ ГПа, вызывающего испарение по УРС [10], составляет ± 50 ГПа.

Для исходно теплого Fe значение S_0 больше, а значение ρ_0 меньше, чем для холодного вещества. При таком соотношении этих на-

чальных величин ударная зависимость $S(P)$ для теплого вещества проходит над зависимостью $S(P)$ для холодного вещества (например, зависимость (2) над (1)). Вследствие этого ударное давление P , приводящее к испарению при изэнтропической разгрузке до $P = 1$ атм, для теплого вещества меньше, чем для холодного. Снижение составляет ≈ 100 ГПа (420 и 540 ГПа [9], 387 и 507 ГПа [1], 262 и 359 ГПа [10]). С учетом этого снижения в случае, когда более реалистично для исходно холодного вещества значение 359 ГПа по сравнению с 540 и 507 ГПа, для теплого вещества более реалистичным будет значение 262 ГПа по сравнению с 420 и 387 ГПа.

Для исходно горячего Fe приводящее к началу испарения при изэнтропической разгрузке до $P = 1$ атм ударное давление $P = 132$ ГПа [10] значительно меньше $P = 365$ ГПа [2]. Представляется, что основная причина высокого значения $P = 365$ ГПа состоит в следующем. В [2] в качестве критерия испарения при разгрузке до $P = 1$ атм использовано значение $S_1 = 2.36$ Дж/(г·К). Параметрам $P = 1$ атм, $S_1 = 2.36$ Дж/(г·К) по УРС [2] отвечает температура кипения T_1 , которая, как видно из дальнейшего, значительно больше экспериментальной $T_1 = 3133$ К. Если расчетное значение T_1 завышено, то завышено также и расчетное значение $P = 365$ ГПа. Рис. 5 поясняет вывод о высоком значении T_1 [2]. На нем символом a отражено состояние с параметрами $P = 1$ атм, $S = S_1 = 2.36$ Дж/(г·К). На рисунке также изображены взятые из табл. 1 [2] численные значения S в четырех состояниях: $T = 3000$ К, $P = -10$ ГПа (точка 1); $T = 4000$ К, $P = -7.23$ ГПа (точка 2); $T = 4000$ К, $P = 40$ ГПа (точка 3); $T = 5000$ К, $P = -5.03$ ГПа (точка 4). Точки 2 и 3, отвечающие одинаковому значению $T = 4000$ К, соединены прямой линией B . Она характеризует (в первом приближении) зависимость $S(P)$ вдоль изотермы $T = 4000$ К по УРС [2]. Вдоль произвольной изотермы выполняется термодинамическое соотношение

$$\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P, \quad (3)$$

где $V = 1/\rho$ — удельный объем. Из (3) следует, что для веществ с положительным коэффициентом теплового расширения (когда $\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P > 0$) вдоль любой изотермы значение S

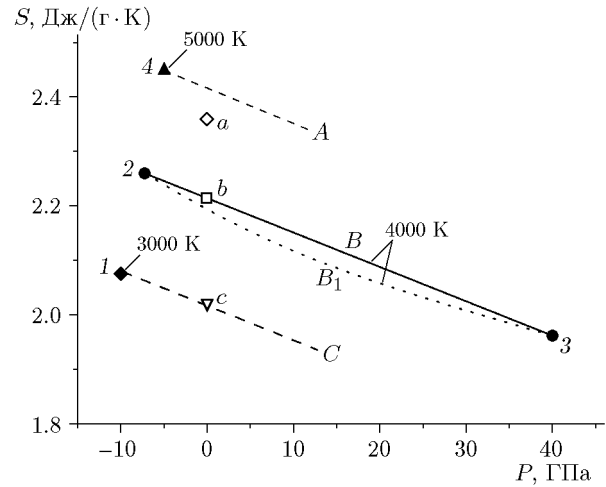


Рис. 5. Зависимость энтропии от давления для Fe по [2]

уменьшается с увеличением P . При этом для большинства жидкостей величина $\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P$ является убывающей функцией P . Это, в частности, подтверждают данные по P , ρ , приведенные в работе [2] на рис. 1 вдоль изотерм $T = 3000, 4000, 5000$ К в интервале $P \approx -10 \div 5$ ГПа. В этом случае зависимость $S(P)$ вдоль любой изотермы обращена выпуклостью вверх, $\left(\frac{\partial^2 S}{\partial P^2}\right)_T > 0$. Поэтому соответствующая УРС [2] зависимость $S(P)$ вдоль изотермы $T = 4000$ К между точками 2 и 3 на рис. 5 проходит под линией B (она качественно изображена кривой B_1). Изменение энтропии вдоль изотерм $T = 3000$ К и $T = 5000$ К по УРС [2] примерно отражено на рис. 5 прямыми линиями A и C , параллельными B (судя по данным P , ρ (см. рис. 1 в [2]), средние значения производной $\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T$ на трех рассматриваемых изотермах качественно не отличаются).

Из рис. 5 видно, что в точке a значение $S = S_1 = 2.36$ Дж/(г·К) ощутимо больше, чем на линии B (и B_1), при давлении $P = 1$ атм. На линии B данное состояние, которому отвечает $S = 2.21$ Дж/(г·К), помечено буквой b . Более высокой энтропии в состоянии a по сравнению с b соответствует также и более высокая температура. Состоянию b отвечает $T = 4000$ К, т. е. в состоянии a значение $T = T_1 > 4000$ К (судя по положению точки 4 и линии A на рис. 5, она близка к 5000 К). Такое высокое значение T_1 по [2] сильно противоречит экспериментально-

му значению $T_1 = 3133$ К. Поскольку реализуемое при разгрузке до $P = 1$ атм значение T_1 завышено, то завышено также и соответствующее ему ударное давление $P = 365$ ГПа. Можно отметить, что, в отличие от [2], рассчитанные согласно УРС [9] и [10] значения $T_1 = 3190$ и 3130 К близки к экспериментальной характеристике $T_1 = 3133$ К.

В [2] значения S_1 и T_1 не рассчитывались на основе УРС (в отличие от [9, 10]), значение $S_1 = 2.36$ Дж/(г·К) назначено. Если в качестве критерия испарения использовать температурный критерий, приняв за начало испарения при разгрузке реализацию при $P = 1$ атм значения T_1 , близкого к экспериментальному $T_1 = 3133$ К, то УРС [2] показывает снижение ударного давления по сравнению с $P = 365$ ГПа. В частности, если принять (назначить), что при $P = 1$ атм вещество начинает кипеть при $T_1 = 3000$ К, то, как видно из рис. 5, по УРС [2] значение S_1 может быть только меньше значения $S = 2.08$ Дж/(г·К), отвечающего точке 1. Из рис. 3 следует, что значению $S = S_1 = 2.08$ Дж/(г·К) на ударной зависимости $S(P)$ [2] для исходно горячего Fe (линия 2 на рис. 3) соответствует ударное давление $P = 185$ ГПа (< 365 ГПа). При этом из-за уменьшения S с увеличением P вдоль изотермы $T = 3000$ К (кривая C на рис. 5) для подобного расчета следует использовать значение $S_1 < 2.08$ Дж/(г·К) (качественно соответствующее точке c на линии C рис. 5), что приведет к условию $P < 185$ ГПа.

Можно отметить, что с относительно низким значением $S_1 \leq 2.08$ Дж/(г·К) при $T_1 = 3000$ К согласуется следующее. Согласно [2] при $T = 1800$ К, $P = 0$ модельное значение $S = 1.65$ Дж/(г·К), что на ≈ 0.14 Дж/(г·К) меньше экспериментального [4]. Если предположить, что в точке кипения при $T_1 = 3133$ К модельное [2] значение S_1 на столько же меньше экспериментального $S_1 = 2.24$ Дж/(г·К), получим $S_1 \approx 2.1$ Дж/(г·К), что близко к 2.08 Дж/(г·К).

Таким образом, внесение описанных корректив в значение S_1 приводит к тому, что подход [2] для горячего Fe дает существенное снижение ударного давления по сравнению с $P = 365$ ГПа (происходит смещение оценки в сторону значения 132 ГПа [10]).

Использование меньшего по сравнению с $S_1 = 2.36$ Дж/(г·К) значения энтропии уменьшает также значение ударного давле-

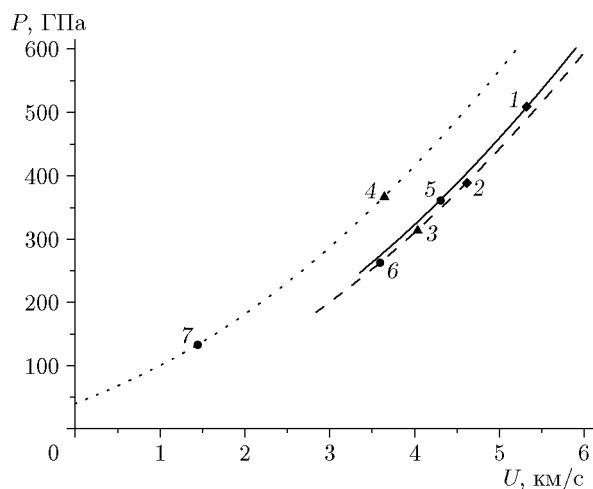


Рис. 6. Зависимость давления от массовой скорости при ударном сжатии исходно холодного, теплого и горячего Fe:

сплошная, штриховая и пунктирная линии — расчетные ударные адиабаты по УРС [10] для исходно холодного, теплого и горячего Fe соответственно; ударное давление, вызывающее испарение при изоэнтропической разгрузке до 1 атм: 1, 2 — данные [1] для исходно холодного и теплого вещества соответственно; 3, 4 — данные [2] для теплого и горячего вещества; 5–7 — расчет по УРС [10] для холодного, теплого и горячего вещества

ния для исходно теплого Fe по сравнению с $P = 312$ ГПа [2]. Если принять, что $S_1 = 2.08$ Дж/(г·К), то с помощью приведенной в [2] ударной зависимости $S(P)$ для теплого Fe можно получить, что к его испарению приводит ударное давление $P = 224$ ГПа. Оно значительно меньше результатов [9] (420 ГПа) и [1] (387 ГПа) и несколько (на $\approx 20\%$) меньше значения по УРС [10] (261 ГПа).

В итоге можно сделать вывод, что при названном уменьшенном значении S_1 по сравнению с $S_1 = 2.36$ Дж/(г·К) УРС [2] для горячего и теплого Fe показывает, как и УРС [10], сравнительно низкие значения вызывающего испарение ударного давления. Для теплого Fe в обоих подходах эта характеристика существенно меньше по сравнению с данными [9, 1].

На рис. 6 изображены ударные адиабаты исходно холодного, теплого и горячего Fe согласно УРС [10] в координатах P, U (U — массовая скорость вещества за фронтом ударной волны, рассчитываемая на основе законов сохранения при ударном сжатии [3]). Цифрами 1, 2 на рис. 6 показаны состояния с давлением, соответствующим испарению вещества при разгрузке исходно холодного и теплого ве-

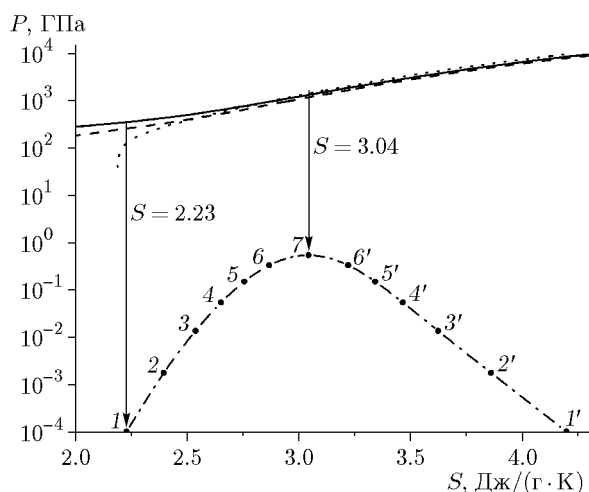


Рис. 7. Модельные по УРС Fe [10] зависимости давления от энтропии при ударном сжатии исходно холодного (сплошная линия), теплого (штриховая линия), горячего (пунктирная линия) вещества и вдоль линии равновесия жидкость — пар (штрихпунктирная линия):

1, 1', ..., 6, 6' — $T = 3130, 4000, 5000, 6000, 7000, 8000$ K; 1, ..., 6 — $\rho = 6.35, 5.91, 5.37, 4.77, 4.07, 3.16$ г/см³; 1', ..., 6' — $\rho = 0.000218, 0.00311, 0.0207, 0.0773, 0.217, 0.553$ г/см³; точка 7 — критическая ($T_C = 8751$ K, $\rho_C = 1.63$ г/см³)

щества согласно [1], цифрами 3, 4 — аналогичные состояния для теплого и горячего вещества по [2], цифрами 5–7 — те же данные для холодного, теплого и горячего по [10]. В случае симметричного соосного соударения Fe — Fe (когда значения P_0, T_0 первого и второго сталкивающихся объектов одинаковы) для достижения испарения при разгрузке требуется удар с относительной скоростью $W = 2U$, где U — скорость в состояниях 1–7 на рис. 6. Состояниям 5, 6, 7 соответствуют значения $W = 8.58, 7.16, 2.88$ км/с. В случае холодного Fe определенное по УРС [10] значение W на ≈ 2 км/с меньше, чем по [1] (состояния 5 и 1 на рис. 7); в случае теплого вещества скорость W меньше на ≈ 2 км/с, чем по [1] (состояния 6 и 2), и на ≈ 1 км/с, чем по [2] (состояния 6 и 3); в случае горячего вещества значение W меньше на ≈ 4 км/с, чем по [2] (состояния 7 и 4).

При изоэнтальпической разгрузке после сильного ударного воздействия вещество может достичь критической точки кривой равновесия жидкость — пар. Это реализуется при выполнении условия $S(P) = S_C$. Для Fe в критической точке по УРС [10] расчетные параметры равны $P_C = 0.548$ ГПа, $T_C = 8751$ K,

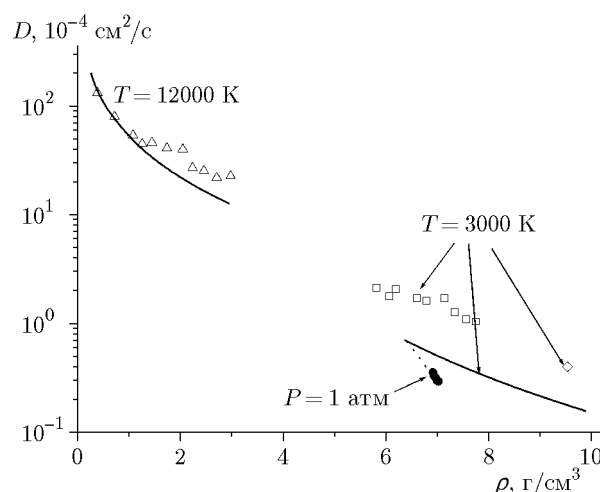


Рис. 8. Зависимость коэффициента самодиффузии от плотности вдоль изотерм и изобары $P = 1$ атм жидкого Fe:

треугольники и квадраты — расчетные данные [2] при $T = 12000, 3000$ K; ромб — расчет [18] при $T = 3000$ K; сплошные линии — расчет по модели [19, 10] при $T = 12000, 3000$ K; кружки — эксперимент [22] при $T = 1820 \div 1940$ K и $P = 1$ атм; пунктирная линия — расчет по модели [19, 10] при $T = 1811 \div 3000$ K и $P = 1$ атм

$\rho_C = 1.63$ г/см³, $S_C = 3.04$ Дж/(г·K), а по УРС [2] они составляют $P_C \approx 0.4 \div 0.7$ ГПа, $T_C \approx 9000 \div 9350$ K, $\rho_C \approx 1.85 \div 2.40$ г/см³, $S_C \approx 3.25$ Дж/(г·K). Между этими данными в УРС Fe [10] и [2] имеется неплохое соответствие. Согласно [2] для теплого Fe критическая точка достигается при ударном давлении $P = 605$ ГПа, для горячего — при $P = 825$ ГПа. По УРС [10] аналогичные характеристики равны 1195 и 1445 ГПа соответственно (см. рис. 3 и 7). Они примерно в два раза больше определенных по [2]. Для исходно холодного Fe согласно УРС [10] условие $S(P) = S_C$ выполняется при ударном давлении 1350 ГПа (см. рис. 3 и 7). В [1] подобные характеристики не определялись. Если принять $S_C = 3.04$ Дж/(г·K), то для теплого вещества на основе формулы (2) (-0.1717 Дж/(г·K)) ударное давление составит $P = 1143$ ГПа, для холодного вещества на основе (1) (-0.1717 Дж/(г·K)) — $P = 1323$ ГПа. Эти значения близки к полученным здесь по УРС [10].

Для моделирования процессов массопереноса требуются коэффициенты диффузии. В [2], наряду с данными об УРС, приведены результаты расчетов методом молекулярной динамики коэффициента самодиффузии D

жидкого и газообразного Fe в интервале $T = 3000 \div 12000$ К. В настоящей работе также были выполнены расчеты этой характеристики. На рис. 8 показаны расчетные значения D [2] вдоль изотерм $T = 3000$ К (жидкость) и $T = 12000$ К (газообразное закригическое вещество). Там же приведен результат расчета методом молекулярной динамики [18] при $T = 3000$ К и более высоком по сравнению с [2] значении плотности. В [19] предложена модель коэффициентов переноса жидкости и газа для УРС в форме модифицированной модели Ван-дер-Ваальса (см. также [20, 21]). Это модельное УРС использовалось в [10] для описания жидкой и газообразной фаз Fe. В [10] приведены результаты расчетов по модели [19] коэффициента вязкости l -Fe. Здесь с помощью этой модели выполнен расчет коэффициента D . На рис. 8 представлены расчетные зависимости согласно [19, 10] вдоль изотерм $T = 3000$, 12000 К. Эта модель показывает качественное соответствие с результатами [2, 18] в широком диапазоне параметров ρ , T (при этом D изменяется на несколько порядков). При $T = 12000$ К имеется количественное соответствие с расчетом [2]. В случае $T = 3000$ К расчет по модели [19, 10] дает в 2–3 раза более низкие значения D по сравнению с [2, 18] (аналогичное соответствие с данными [2] при $\rho < 8$ г/см³ и [18] при $\rho > 9.5$ г/см³ имеется вдоль изотерм $T \approx 4000 \div 7000$ К). Не исключено, что определение D по [19, 10] при $T = 3000$ К более правдоподобно. Об этом свидетельствует хорошее соответствие модели экспериментальным данным [22], полученным при $P = 1$ атм в интервале $T = 1820 \div 1940$ К. Результаты расчетов и экспериментов даны на рис. 8. Для уверенности в правильности расчетов по моделям [2, 18] при $T = 3000$ К (и других относительно низких температурах) требуется их сопоставление с экспериментом [22] при $T = 1820 \div 1940$ К. Если они покажут более высокие значения D , то можно полагать, что и в случае $T = 3000$ К расчеты на их основе дают завышенный результат.

В заключение кратко суммируем вышеизложенное. В работе с помощью многофазного УРС [10] определены значения ударного давления, приводящего к испарению Fe при изотропической разгрузке до 1 атм, для исходно холодного (начальные условия $P_0 = 1$ атм, $T_0 = 298$ К), теплого ($P_0 = 1$ ГПа, $T_0 = 1500$ К) и горячего ($P_0 = 40$ ГПа, $T_0 = 4000$ К) состо-

яний вещества. Они равны 359, 261, 132 ГПа соответственно. Эти значения, в целом, меньше других известных оценок. Приведены аргументы в обоснование завышенности последних. В приложении к столкновению планетезималей уменьшение ударного давления приводит к снижению на $\approx 1 \div 4$ км/с скорости их взаимного столкновения, требуемой для испарения после удара содержащегося в них Fe.

Автор выражает благодарность В. В. Хрусталеву и К. В. Хищенко за обсуждение ряда вопросов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kraus R. G., Root S., Lemke R. W., Stewart S. T., Jacobsen S. B., Mattsson T. R. Impact vaporization of planetesimal cores in the late stages of planet formation // *Nat. Geosci.* — 2015. — V. 8. — P. 269–272. — DOI: 10.1038/ngeo2369.
2. Li Z., Caracas R., Soubiran F. Partial core vaporization during Giant Impacts inferred from the entropy and the critical point of iron // *Earth Planet. Sci. Lett.* — 2020. — V. 547. — 116463. — DOI: 10.1016/j.epsl.2020.116463.
3. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — М.: Физматгиз, 1963.
4. Chase M. W. NIST-JANAF Thermochemical Tables. — 4th ed. — Am. Inst. of Physics, 1998.
5. Hixson R. S., Winkler M. A., Hodgdon M. L. Sound speed and thermophysical properties of liquid iron and nickel // *Phys. Rev. B.* — 1990. — V. 42, N 10. — P. 6485–6491. — DOI: 10.1103/PhysRevB.42.6485.
6. Beutl M., Pottlacher G., Jäger H. Thermophysical properties of liquid iron // *Int. J. Thermophys.* — 1994. — V. 15, N 6. — P. 1323–1331. — DOI: 10.1007/BF01458840.
7. Савватимский А. И., Онуфриев С. В. Теплоемкость жидкого железа от точки плавления до точки кипения // *Теплофизика высоких температур.* — 2018. — Т. 56, № 6. — С. 953–955. — DOI: 10.31857/S004036440003575-6.
8. Pierazzo E., Vickery A. M., Melosh H. J. A reevaluation of impact melt production // *Icarus.* — 1997. — V. 127, N 2. — P. 408–423. — DOI: 10.1006/icar.1997.5713.
9. Kerley G. I. Multiphase Equation of State for Iron // *Tech. Rep. SAND93-0027.* — Sandia National Laboratories, 1993.
10. Медведев А. Б. Широкодиапазонное многофазное уравнение состояния железа // *Физика горения и взрыва.* — 2014. — Т. 50, № 5. — С. 91–108.

11. Kuwayama Y., Morard G., Nakajima Y., Hirose K., Baron A. Q. R., Kawaguchi S. I., Tsuchiya T., Ishikawa D., Hirao N., Ohishi Y. Equation of state of liquid iron under extreme conditions // Phys. Rev. Lett. — 2020. — V. 124, N 16. — 165701. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.124.165701.
12. Brown J. M., Fritz J. N., Hixson R. S. Hugoniot data for iron // J. Appl. Phys. — 2000. — V. 88, N 9. — P. 5496–5498. — DOI: 10.1063/1.1319320.
13. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ: справочник / под ред. Р. Ф. Трунина. — Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2006.
14. Sinmyo R., Hirose K., Ohishi Y. Melting curve of iron to 290 GPa determined in a resistance-heated diamond-anvil cell // Earth Planet. Sci. Lett. — 2019. — V. 510. — P. 45–52. — DOI: 10.1016/j.epsl.2019.01.006.
15. Anzellini S., Dewaele A., Mezouar M., Loubeyre P., Morard G. Melting of iron at Earth's inner core boundary based on fast x-ray diffraction // Science. — 2013. — V. 340, N 6131. — P. 464–466. — DOI: 10.1126/science.1233514.
16. Harmand M., Ravasio A., Mazevet S., et al. X-ray absorption spectroscopy of iron at multi-megabar pressures in laser shock experiments // Phys. Rev. B. — 2015. — V. 92, N 2. — 024108. — DOI: 10.1103/PhysRevB.92.024108.
17. Torchio R., Occelli F., Mathon O., et al. Probing local and electronic structure in Warm Dense Matter: single pulse synchrotron x-ray absorption spectroscopy on shocked Fe // Sci. Rep. — 2016. — V. 6. — 26402. — DOI: 10.1038/srep26402.
18. Alfè D., Kresse G., Gillan M. J. Structure and dynamics of liquid iron under Earth's core conditions // Phys. Rev. B. — 2000. — V. 61, N 1. — P. 132–142. — DOI: 10.1103/PhysRevB.61.132.
19. Медведев А. Б. Коэффициенты переноса в модифицированной модели Ван-дер-Ваальса // Теплофизика высоких температур. — 1995. — Т. 33, № 2. — С. 227–235.
20. 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.
21. Медведев А. Б. Оценка коэффициентов самодиффузии и взаимной диффузии бинарной смеси на основе модифицированной модели Ван-дер-Ваальса // Физика горения и взрыва. — 2017. — Т. 53, № 4. — С. 58–71. — DOI: 10.15372/FGV20170406.
22. Meyer A., Hennig L., Kargl F., Unruh T. Iron self diffusion in liquid pure iron and iron-carbon alloys // J. Phys.: Condens. Matter. — 2019. — V. 31, N 39. — 395401. — DOI: 10.1088/1361-648X/ab2855.

Поступила в редакцию 21.09.2021.

После доработки 23.12.2021.

Принята к публикации 12.01.2022.