

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ПЕРИКЛАЗА ПРИ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

К. К. Маевский

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск,
konstantinm@hydro.nsc.ru

Периклаз (MgO) является одним из важных материалов, которые составляют мантии планет земной группы. В связи с этим его свойства при высоких температурах и давлениях отражают природу планетарных недр. Численное моделирование ударно-волнового нагружения MgO с учетом полиморфного фазового перехода в диапазоне давления $325 \div 400$ ГПа выполнено по термодинамически равновесной модели. Определены параметры согласованного уравнения состояния для фаз высокого и низкого давления периклаза (MgO I и MgO II). Проведено моделирование термодинамических параметров этих фаз. Построены ударные адиабаты однократного и двукратного сжатия в диапазоне $1 \div 1000$ ГПа, рассчитаны значения теплоемкости вдоль нормальной изобары, энтропии в зависимости от температуры, а также температуры вдоль ударной адиабаты. Проведена верификация результатов моделирования по результатам экспериментов и расчетов других авторов.

Ключевые слова: уравнение состояния вещества, фазовый переход, силикаты магния, периклаз.

DOI 10.15372/FGV2022.9278
EDN NIKTDN

ВВЕДЕНИЕ

Экспериментальные и теоретические исследования высокогенеретического воздействия на оксиды, в частности на периклаз MgO , представляют большой интерес для понимания состава и физического состояния глубинных недр Земли и других планет. Такие работы помогают решать фундаментальные вопросы о структуре, динамике и эволюции глубин Земли [1]. Как известно, силикаты магния доминируют в мантии Земли и предположительно станут основными составляющими в скалистых экзопланетах. В случае приложения высокого давления данные материалы испытывают фазовые превращения. В частности, наблюдалась диссоциация Mg_2SiO_4 в оксиды MgO и SiO_2 при давлении 33 ГПа. Такое давление предполагается в мантии Земли на глубине 1 000 км [2]. В связи с этим проводятся многочисленные исследования возможных фазовых переходов в MgO [3–9]. В [3] отмечалось, что MgSiO_3 разлагается на MgO и SiO_2 . При высоком давлении (2.3 ТПа) Mg_2SiO_4 также в конечном итоге разлагается на MgO и SiO_2 . Ожидается, что переход к фазе высокого давления MgO II произойдет в мантиях больших скалистых экзо-

планет [4]. Прямая идентификация данной фазы выполнена с использованием лазера [5]. Эксперименты проводились с периклазом, сжатым до 900 ГПа. Измерения показали присутствие фазы низкого давления MgO I до значений давления 560 ГПа, тогда как фаза MgO II наблюдалась в диапазоне 570 \div 900 ГПа. Наличие фазы высокого давления при более высоком давлении согласуется с теоретическими предположениями, однако экспериментально измеренное давление перехода (570 ГПа) существенно выше, чем предсказывалось теорией вдоль изоэнтропы (450 ГПа). Как отмечается в [5], понимание возможных факторов кинетики, связанных с фазовыми превращениями в условиях сверхвысокого давления и температуры, является важной целью будущих экспериментов. По измерениям состояний на адиабате Гюгони и ударных температур [6] был сделан вывод о серии переходов в интервале от 270 до 500 ГПа, включая кристаллизацию MgO из расплава, переход твердой фазы MgO I в твердую фазу MgO II и переплавку при более высоком давлении. Однако в более поздних экспериментах [7] с использованием аналогичных методов нагружения разрывы в этом диапазоне не наблюдались. В работе [7] моделировались физические свойства MgO в диапазоне от тех давлений, ко-

торые встречаются в мантии Земли, до тех, которые ожидаются внутри гигантских планет, таких как Юпитер. Сравнивались результаты моделирования с предыдущими расчетами *ab initio*, которые до сих пор ограничивались диапазоном давления, соответствующим мантии Земли, и переходом фазы низкого давления в фазу высокого давления $\text{MgO I} \rightarrow \text{MgO II}$ при давлении около 600 ГПа.

Описание MgO , MgSiO_3 и Mg_2SiO_4 в их различных формах все еще вызывает вопросы, особенно при давлениях выше 200 ГПа, и дебаты о возникновении фазовых переходов вдоль кривых Гюгонио в настоящее время продолжаются [7, 8]. Фазовая диаграмма MgO из первых принципов в широком диапазоне давлений и температур исследована в [9].

В настоящей работе представлены результаты численного моделирования высокоэнергетического нагружения периклаза. Авторская модель термодинамически равновесных компонентов (thermodynamic equilibrium components, TEC) [10, 11] основана на предположении, что все компоненты смеси, включая газ в порах, имеют равные значения скорости, давления и температуры. Известно, что для многих твердых тел (металлы, полупроводники, практически все минералы и горные породы) ударно-волновое нагружение приводит к полиморфным фазовым превращениям. Равенство давлений фазового перехода как в статике, так и в динамике характерно для большинства превращений [12]. Для описания поведения различных материалов в области полиморфного фазового перехода исследуемый образец рассматривается в этой области как смесь фаз низкого и высокого давления [13–15]. Для расчетов динамического нагружения периклаза используется согласованное уравнение состояния, разработанное для модифицированной модели TEC2 [16, 17]. Построение уравнений состояния вещества само по себе является большой научной задачей, для решения которой существует большое число подходов [18]. С учетом наличия фазовых переходов, область которых может быть рассмотрена как смесь фаз низкого и высокого давления по аналогии с [19], предпочтительно использовать достаточно простую модель уравнения состояния. Разнообразие исследуемых материалов вызывает большой интерес к уравнениям состояния с достаточно малым числом параметров [20–23].

Многочисленные теоретические и экспери-

ментальные работы по исследованию свойств и поведения оксида магния при высоких давлениях и температурах позволяют верифицировать результаты моделирования с ранее полученными результатами [24, 25]. Целью данного исследования является построение уравнений состояния периклаза для фаз MgO I и MgO II , позволяющих достоверно рассчитывать термодинамические параметры, такие как давление, сжатие, массовая и волновая скорости, при моделировании ударно-волнового нагружения.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

При моделировании ударно-волнового нагружения уравнения состояния конденсированного компонента записываются как суммы потенциальных и тепловых компонентов давления P_C , P_T и удельной энергии E_C , E_T :

$$P_C(\sigma) = \frac{\rho_0 c_0^2}{n} (\sigma^n - 1), \quad (1)$$

$$P_T(\sigma, \tau) = c_V \rho_0 T_0 (\tau - 1) \sigma k \frac{1 + a_1 \tau}{1 + a_2 \tau},$$

$$E_C(\sigma) = \frac{c_0^2}{n} \left(\frac{1}{n-1} (\sigma^{n-1} - 1) - 1 + \frac{1}{\sigma} \right), \quad (2)$$

$$E_T(\sigma, \tau) = F(\tau) - c_V T_0 k \times$$

$$\times \frac{1 + 2a_2 \tau + (a_1 - a_2 + a_1 a_2) \tau^2}{(1 + a_2 \tau)^2} \ln(\sigma), \quad (3)$$

при этом

$$F(\tau) = c_V T_0 \left[(\tau - 1) \left(\lambda - \frac{b_1}{b_2} \right) - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{b_2} \left(1 - \frac{b_1}{b_2} \right) \ln \left(\frac{1 + b_2 \tau}{1 + b_2} \right) \right].$$

Для определения параметров k , a_1 , a_2 используется функция $\Gamma(V, T) = P_T V / E_T$, отражающая вклад тепловых компонентов. Значения λ , b_1 , b_2 определяются по соответствию экспериментальным данным для $c_V(T)$.

Для этого уравнения состояния получены выражения для теплоемкости вдоль изохоры c_V , для энтропии $S(\sigma, \tau)$ и термодинамического потенциала Гиббса $G(\sigma, \tau)$:

$$c_V(\sigma, \tau) = c_V \left[\lambda - \frac{1 + b_1 \tau}{1 + b_2 \tau} \right] -$$

$$-c_{V0}k \frac{2\tau(a_1 - a_2 + a_1a_2 - a_2^2)}{(1 + a_2\tau)^3} \ln(\sigma), \quad (4)$$

$$S(\sigma, \tau) = c_V[S_1(\sigma, \tau) + S_2(\sigma, \tau)] + S_3, \quad (5)$$

$$S_1(\sigma, \tau) = (\lambda - 1) \ln(\tau) + \left(1 - \frac{b_1}{b_2}\right) \ln(1 + b_2\tau) + k \frac{a_1 - a_2 + a_1a_2 - a_2^2}{a_2(1 + a_2\tau)^2} \ln(\sigma),$$

$$S_2(\sigma, \tau) = k \frac{a_1 - 1 - a_2 - 2a_1\tau - a_1a_2\tau^2}{(1 + a_2\tau)^2} \ln(\sigma),$$

$$G(\sigma, \tau) = E(\sigma, \tau) + \frac{P(\sigma, \tau)}{\sigma\rho_0} - T_0\tau S(\sigma, \tau). \quad (6)$$

В (1)–(6) используются следующие обозначения: ρ , ρ_0 — текущая и начальная плотность, $\sigma = \rho/\rho_0$ — степень сжатия, T — температура, T_0 — температура при нормальных условиях, $\tau = T/T_0$ — относительная температура, c_{V0} и c_0 — соответственно теплоемкость и скорость звука при нормальных условиях, n — значение производной изотермического модуля упругости. Величины P_C , P_T и E_C , E_T при нормальных условиях ($\rho = \rho_0$, $T = T_0$) в рассматриваемой модели полагаются равными нулю.

Для построения ударных адиабат гетерогенных материалов используются условия сохранения потока массы каждого компонента смеси и условия сохранения потоков импульса и энергии смеси в целом на фронте ударной волны (газ в порах рассматривается как один из компонентов). При таком подходе чистые вещества рассматриваются как смесь с одним конденсированным компонентом [15]. В итоге получается следующее выражение для исследуемого материала, в состав которого входят z конденсированных компонентов с начальными объемными долями μ_{i0} :

$$P = \left\{ \sum_{i=1}^z A_i \frac{\mu_{i0}}{\sigma_i} \left[\left(h_i - \frac{n_i + 1}{n_i - 1} \right) \sigma_i^{z_i} + \frac{2n_i \sigma_i}{n_i - 1} - h_i - 1 \right] \right\} / \right. \\ \left. / \left\{ \sum_{i=1}^z \frac{\mu_{i0}}{\sigma_i} h_i + \frac{h_g}{\sigma_g} \left(1 - \sum_{i=1}^z \mu_{i0} \right) - 1 \right\}, \right. \\ h_i = \frac{2}{\Gamma_i} + 1, \quad h_g = \frac{2}{\gamma - 1} + 1.$$

Здесь $\sigma_i = \rho_i/\rho_{i0}$, $\sigma_g = \rho_g/\rho_{g0}$ — степень сжатия соответствующего компонента; для газа берется уравнение состояния идеального газа; ρ_g , ρ_{g0} — текущая и начальная плотность газа, параметры которого соответствуют воздуху, аналогично [16]; $\gamma = 1.41$ — показатель адиабаты. Функция $\Gamma = P_T V/E_T$ определяет вклад тепловых компонентов давления (1) и удельной энергии (3) [17]. С учетом условия равенства температур компонентов можно построить соответствующие ударные адиабаты.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Параметры двух фаз периклаза приведены в табл. 1. Методика определения параметров конденсированных компонентов описана в [15]. Для верификации модели проведено сравнение результатов моделирования с имеющимися данными для двух фаз периклаза. Изотерма $T = 300$ К для периклаза MgO I и результаты модельных расчетов [26, 27] показаны на рис. 1. Наблюдаемое отклонение данных от расчетной кривой связано с тем, что расчеты [26, 27] проводились без учета фазового перехода.

Значения изотермического модуля упругости MgO I используемой модели B_0 и его производная n при $T = 300$ К приведены в табл. 2 и сопоставлены с экспериментальными данными и другими расчетами. Рассчитанный модуль

Параметры уравнения состояния периклаза

Таблица 1

| Периклаз | ρ_0 , г/см ³ | c_{V0} , Дж/(кг · К) | c_0 , м/с | n | S_3 | a_1 | a_2 | k | b_1 | b_2 | λ |
|----------|---------------------------------|---------------------------|----------------|------|--------|-----------------------|-----------------------|-------|--------|-------|-----------|
| MgO I | 3.584 | 937.2 | 6 510 | 4.15 | -4 091 | $2.049 \cdot 10^{-3}$ | $4.277 \cdot 10^{-3}$ | 1.253 | -8.826 | 4.347 | -0.505 |
| MgO II | 4.050 | 937.2 | 6 130 | 4.5 | -5 545 | $1.56 \cdot 10^{-4}$ | $3.78 \cdot 10^{-4}$ | 1.210 | -8.826 | 4.347 | -0.505 |

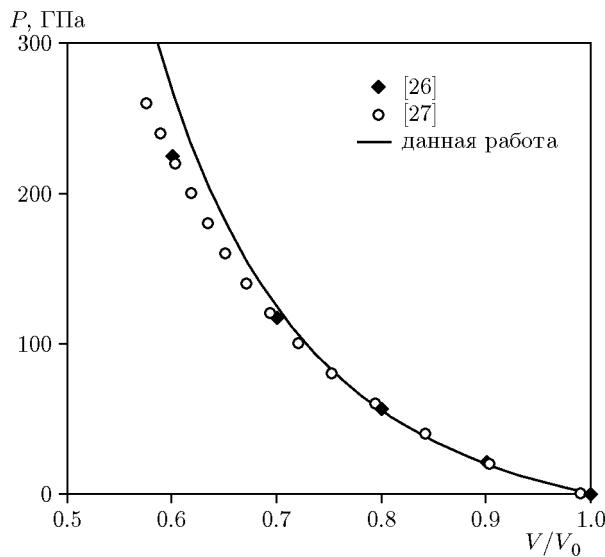


Рис. 1. Давление в зависимости от степени сжатия периклаза

Таблица 2
Модуль упругости MgO I и его производная

| B_0 | n | Источник |
|---------|-------|---------------|
| 157.37 | 4.44 | [28] |
| 160.31 | 4.18 | [29] |
| 161.4 | 4.29 | [30] |
| 153.0 | 4.10 | [31] |
| 160.0 | 4.15 | [32] |
| 161.0 | 3.94 | [33] |
| 160.2 | 3.99 | [34] |
| 160.2 | 4.03 | [35] |
| 161.3 | 4.24 | [36] |
| 151.707 | 4.212 | [37] |
| 154.183 | 4.141 | [37] |
| 163.2 | 4.11 | [38] |
| 151.9 | 4.15 | Данная работа |

упругости и его производная по давлению хорошо согласуются с результатами других авторов.

Для проверки достоверности описания вклада тепловых составляющих в рассматриваемом уравнении состояния рассчитаны значения теплоемкости периклаза при нормальном давлении и температуре до 2000 К. Результаты расчета изохорной теплоемкости c_V

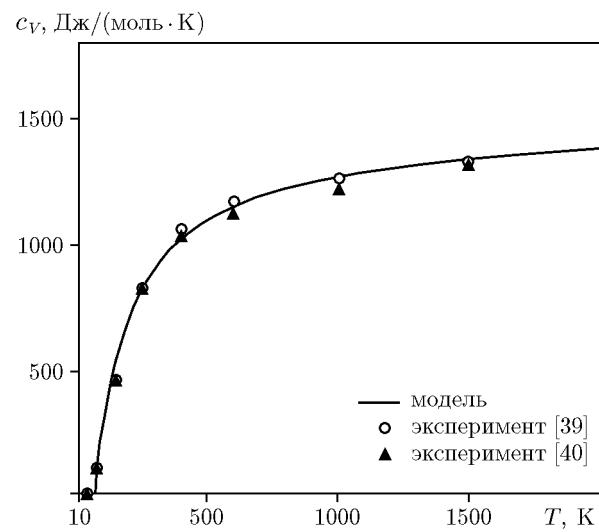


Рис. 2. Теплоемкость периклаза в зависимости от температуры

S , Дж/(кг·К)

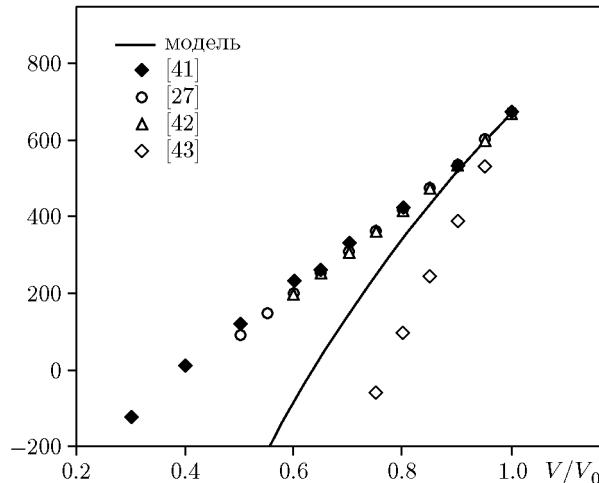


Рис. 3. Энтропия периклаза в зависимости от степени сжатия на изотерме 300 К

периклаза представлены на рис. 2. На нем же приведены данные экспериментов [39, 40].

Расчетные зависимости энтропии от сжатия для периклаза в сравнении с имеющимися данными [27, 41–43] показаны на рис. 3. В [41] отмечалось, что при сжатии в 2–3 раза при давлениях 400–600 ГПа энтропия стремится к нулевому значению, при этом резкое падение энтропии является предвестником фазового перехода.

Расчетные зависимости энтропии от температуры приведены на рис. 4. Достигнуто хорошее соответствие результатов расчета с данными [44].

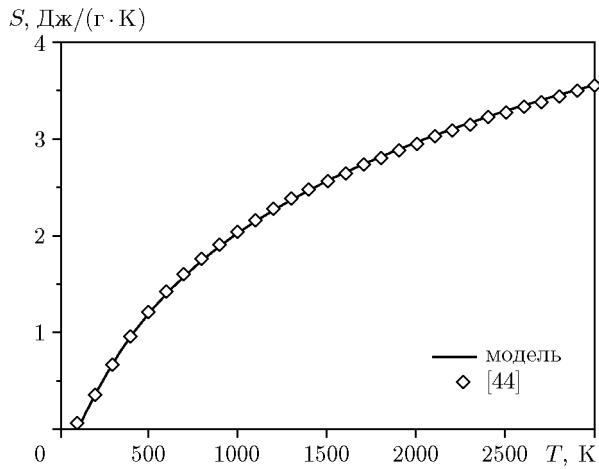


Рис. 4. Энтропия периклаза в зависимости от температуры

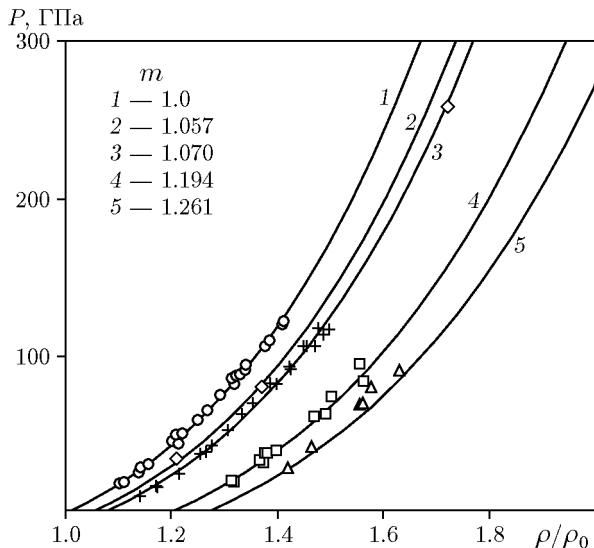


Рис. 5. Ударные адиабаты периклаза различной пористости [24, 25]

Результаты моделирования ударно-волнового нагружения периклаза пористостью $m = 1.0, 1.057, 1.070, 1.194, 1.261$ (данные экспериментов [24, 25]) приведены на рис. 5 в зависимости от степени сжатия. При $m = 1$ плотность периклаза $\rho_0 = 3.584 \text{ г/см}^3$. Получено достоверное описание имеющихся экспериментальных данных при всех значениях пористости. Некоторое отклонение от расчетной кривой одной точки в случае $m = 1.057$ при давлении 258 ГПа можно трактовать как влияние фазового перехода.

Для получения информации о термодинамических свойствах веществ в интервале плотностей, превышающих плотность однократно-

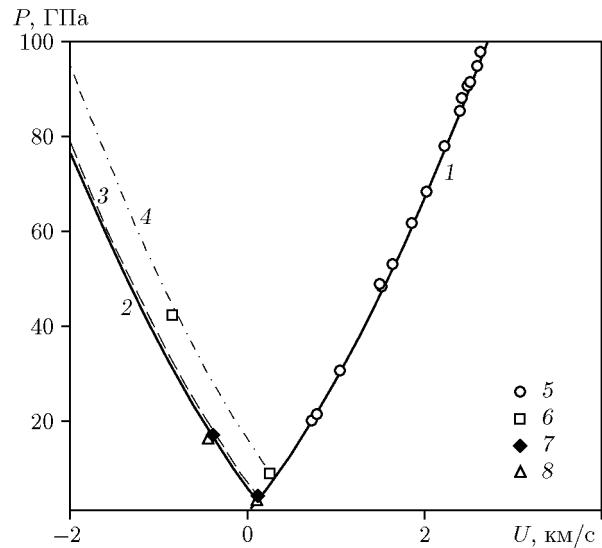


Рис. 6. Ударная адиабата и адиабаты двукратного сжатия периклаза:
расчет: линия 1 — ударная адиабата, линии 2—4 — двукратное сжатие; эксперимент: 5—8 — данные [25]

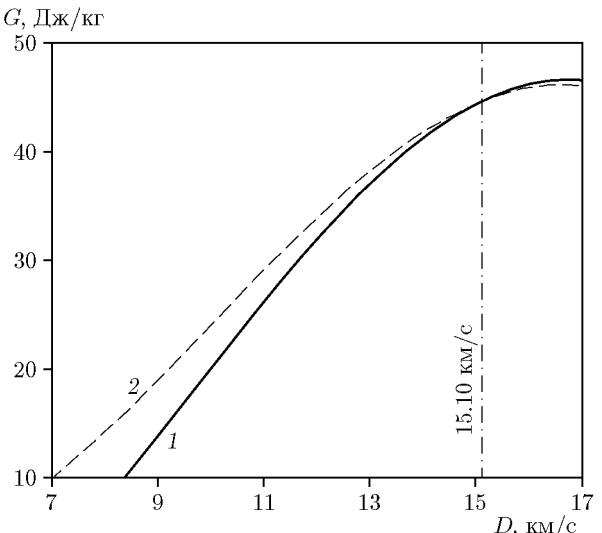


Рис. 7. Термодинамический потенциал периклаза:
линия 1 — расчет для MgO I, линия 2 — для MgO II

го сжатия, регистрируются состояния, возникающие при повторном ударном сжатии [45]. Как видно из приведенных на рис. 6 расчетов, рассматриваемая модель позволяет достоверно описать в том числе и экспериментальные данные по двойному сжатию периклаза.

Расчетные зависимости термодинамического потенциала периклаза показаны на рис. 7. Дополнительно нанесена линия, соот-

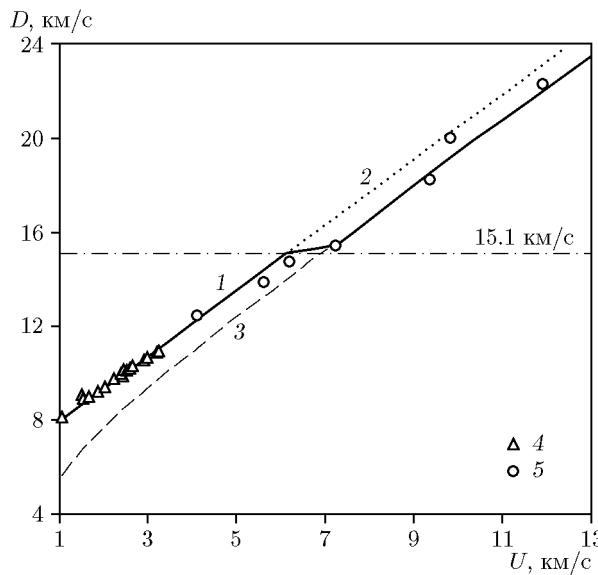


Рис. 8. Ударные адиабаты периклаза:

линии: 1 — расчет с учетом фазового перехода, 2 — расчет для MgO I , 3 — расчет для MgO II ; точки — эксперимент: 4 — [46], 5 — [47]

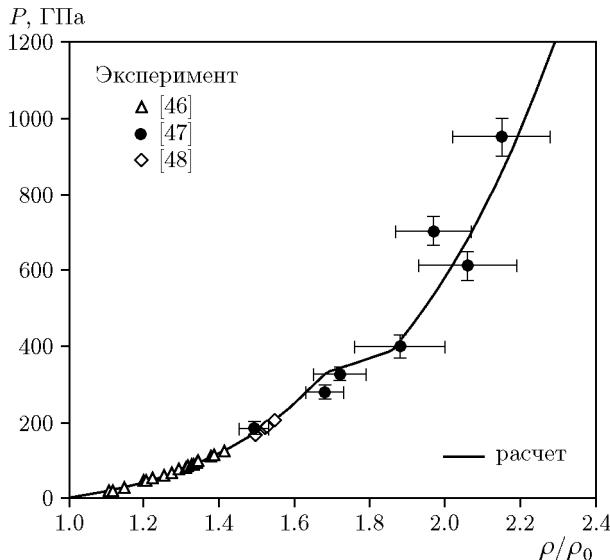


Рис. 9. Ударные адиабаты периклаза. Давление в зависимости от сжатия

ветствующая волновой скорости 15.10 км/с, где значения термодинамических потенциалов Гиббса для MgO I и MgO II равны. Значение давления 325 ГПа фазы MgO I при этой скорости рассматривается как начало фазового перехода при высоконергетическом воздействии.

Результаты моделирования ударно-волнового нагружения периклаза и данные, полученные на основании экспериментов

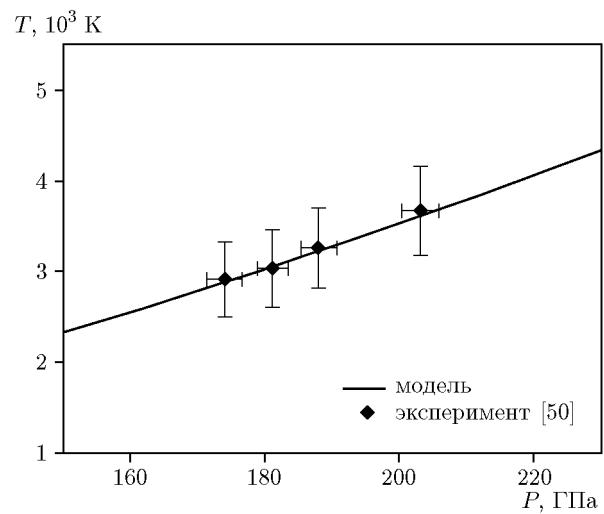


Рис. 10. Сравнение температур вдоль ударной адиабаты периклаза, рассчитанных по модели и полученных в экспериментах [50]

[46–48], приведены на рис. 8 в переменных волновая скорость — массовая скорость и на рис. 9 в переменных давление — степень сжатия. Начало фазового перехода для периклаза близко к области изменения плотности Земли при давлении 330 ГПа (приведено в [49]). Можно предположить, что фазовые переходы, в том числе и периклаза, вносят свой вклад в изменение плотности мантии Земли не только в области давления 25 ГПа, что отмечалось ранее в [27], но и при более высоких давлениях. Плотность $\rho_0 = 4.050 \text{ г}/\text{см}^3$ фазы высокого давления MgO II определена исходя из уменьшения объема на 13 % по экспериментальным данным [47]. Излом кривой при давлении 380 ГПа определяется как окончание фазового перехода, т. е. полный переход периклаза в фазу MgO II при ударно-волновом воздействии. Получено достоверное описание имеющихся данных в пределах точности экспериментов.

На рис. 10 приведены расчетно-экспериментальные оценки из работы [50] температуры вдоль ударной адиабаты периклаза, а также расчеты для MgO I по используемой модели. Расчетная кривая для температуры не выходит за область разброса экспериментальных данных.

По результатам проведенного моделирования можно сделать вывод, что используемая модель расчета термодинамических параметров при высоких динамических нагрузках позволяет описывать поведение периклаза. Пока-

зано хорошее соответствие расчетов данным экспериментов. Отклонение расчетных точек на рис. 5 от данных, полученных на основании эксперимента, возможно связано с тем, что приведен расчет для фазы низкого давления. При пористости образца 1.057 и соответствующем давлении 258 ГПа, по-видимому, уже начинается область фазового перехода, если исходить из того, что для пористых материалов фазовые переходы начинаются при более низких значениях давления. Проведение соответствующих экспериментов при более высоких значениях давления для пористых образцов периклаза поможет решить этот вопрос. Высокий уровень интереса к данному материалу подтверждает необходимость дальнейших работ в этом направлении.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе построены термодинамически согласованные малопараметрические уравнения состояния периклаза для двух фаз, MgO I и MgO II. Определены параметры уравнений, позволяющие достоверно описывать значения теплоемкости, энтропии и термодинамического потенциала Гиббса периклаза для двух фаз. Построены ударные адиабаты периклаза в диапазоне давления 1 \div 1000 ГПа. Результаты численного моделирования хорошо соответствуют данным, полученным на основании экспериментов, и не противоречат расчетам других авторов. Данная модель может быть полезной при расчетах термодинамических параметров материалов с компонентами, которые испытывают фазовые переходы при высокоэнергетическом воздействии.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект FWGG-2021-0006).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Автор данной работы заявляет, что у него нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

- Duffy T. S., Smith R. F. Ultra-high pressure dynamic compression of geological materials // *Front. Earth Sci.* — 2019. — V. 7. — Art. number 23. — DOI: 10.3389/feart.2019.00023.
- Kumazawa M., Sawamoto H., Ohtani E., Masaki K. Postspinel phase of forsterite and evolution of the Earth's mantl // *Nature*. — 1974. — V. 247. — P. 356–358. — DOI: 10.17223/19988621/68/2.
- Umemoto K., Wentzcovitch R. M., Allen P. B. Dissociation of MgSiO₃ in the cores of gas giants and terrestrial exoplanets // *Science*. — 2006. — V. 311, N 5763. — P. 983–986. — DOI: 10.1126/science.1120865.
- Wagner F. W., Tosi N., Sohl F., Rauer H., Spohn T. Rocky super-Earth interiors. Structure and internal dynamics of CoRoT-7b and Kepler-10b // *Astron. Astrophys.* — 2012. — V. 541. — A103. — DOI: 10.1051/0004-6361/201118441.
- Cebulla D., Redmer R. Ab initio simulations of MgO under extreme conditions // *Phys. Rev. B*. — 2014. — V. 89, N 13. — 134107. — DOI: 10.1103/PhysRevB.89.134107.
- Sekine T., Ozaki N., Miyanishi K., Asaumi Yu., Kimura T., Albertazzi B., Sato Yu., Sakawa Yo., Sano T., Sugita S., Matsui T., Kodama R. Shock compression response of forsterite above 250 GPa // *Sci. Adv.* — 2016. — V. 2, N 8. — e1600157. — DOI: 10.1126/sciadv.1600157.
- Bolis R. M., Morard G., Vinci T., Ravasio A., Bambrink E., Guaraguaglini M., Koenig M., Musella R., Remus F., Bouchet J., Ozaki N., Miyanishi K., Sekine T., Sakawa Y., Sano T., Kodama R., Guyot F., Benuzzi-Mounaix A. Decaying shock studies of phase transitions in MgO–SiO₂ systems: Implications for the super-Earths' interiors // *Geophys. Res. Lett.* — 2016. — V. 43, N 18. — P. 9475–9483. — DOI: 10.1002/2016GL070466.
- Spaulding D. K., McWilliams R. S., Jeannoz R., Eggert J. H., Celliers P. M., Hicks D. G., Collins G. W., Smith R. F. Evidence for a phase transition in silicate melt at extreme pressure and temperature conditions // *Phys. Rev. Lett.* — 2012. — V. 108, N 6. — 065701. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.065701.
- Belonoshko A. B., Arapan S., Martonak R., Rosengren A. MgO phase diagram from first principles in a wide pressure-temperature range // *Phys. Rev. B*. — 2010. — V. 81, N 5. — 54110. — DOI: 10.1103/PhysRevB.81.054110.
- Маевский К. К. Численное исследование ударно-волнового нагружения металлических композитов на базе W и WC // Журн. техн. физики. — 2021. — Т. 91, № 5. — С. 815–820. — DOI: 10.21883/JTF.2021.05.50694.293-20. — EDN: OEFYOH.
- Маевский К. К., Кинеловский С. А. Thermo-dynamic parameters of mixtures with epoxy as a component under shock wave loading // *J. Phys.: Conf. Ser.* — 2018. — V. 946. — 012113. — DOI: 10.1088/1742-6596/946/1/012113.

12. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — М.: Физматлит, 2008.
13. Маевский К. К., Кинеловский С. А. Термодинамические параметры смесей с нитридом кремния при ударно-волновом воздействии в представлениях равновесной модели // Теплофизика высоких температур. — 2018. — Т. 56, № 6. — С. 932–938. — DOI: 10.31857/S004036440003564-4. — EDN: YSBQOD.
14. Maevskeii K. K. Numerical investigations of oxides and silicates under shockwave loading // J. Phys.: Conf. Ser. — 2017. — V. 894. — 012057. — DOI: 10.1088/1742-6596/894/1/012057.
15. Maevskeii K. K. Modelling of polymorphic phase transitions under shock wave loading // AIP Conf. Proc. — 2019. — V. 2103. — 020009. — DOI: 10.1063/1.5099873.
16. Маевский К. К., Кинеловский С. А. Численное моделирование термодинамических параметров высокопористой меди // Журн. техн. физики. — 2019. — Т. 89, № 8. — С. 1158–1163. — DOI: 10.21883/JTF.2019.08.47885.423-18. — EDN: TJFQBN.
17. Маевский К. К. Численное моделирование термодинамических параметров углерода // Теплофизика высоких температур. — 2021. — Т. 59, № 5. — С. 701–706. — DOI: 10.31857/S0040364421050148. — EDN: UBFIDI.
18. Ломоносов И. В., Фортова С. В. Широкодиапазонные полуэмпирические уравнения состояния вещества для численного моделирования высокоэнергетических процессов // Теплофизика высоких температур. — 2017. — Т. 55, № 4. — С. 596–626. — DOI: 10.7868/S0040364417040111. — EDN: ZCNLAX.
19. Чарахчьян А. А., Милявский В. В., Хищенко К. В. Применение моделей смеси для анализа ударно-волновых экспериментов с неполным фазовым превращением // Теплофизика высоких температур. — 2009. — Т. 47, № 2. — С. 254–261. — EDN: KZYKTB.
20. Ostrik A. V., Nikolaev D. N. Shock induced melting of sapphire // J. Phys.: Conf. Ser. — 2022. — V. 2154. — 012010. — DOI: 10.1088/1742-6596/2154/1/012010.
21. Голубков А. Н., Гударенко Л. Ф., Жерноклетов М. В., Калякин А. А., Новиков М. Г. Ударное сжатие гидрида титана, дейтеридов титана, tantalа и циркония // Физика горения и взрыва. — 2021. — Т. 57, № 4. — С. 106–114. — DOI: 10.15372/FGV20210411. — EDN: GNHPAP.
22. Бордзиловский С. А., Каражанов С. М., Хищенко К. В. Тепловое излучение воды за фронтом отраженной ударной волны // Физика горения и взрыва. — 2018. — Т. 54, № 6. — С. 95–103. — DOI: 10.15372/FGV20180611. — EDN: YOGDBJ.
23. Maevskeii K. K. Numerical simulation of thermodynamic parameters of lithium deuteride and its mixtures under shock wave loading // AIP Conf. Proc. — 2018. — V. 2051, N 1. — 020181. — DOI: 10.1063/1.5083424.
24. LASL Shock Hugoniot Data / S. P. Marsh (Ed.) — Berkeley: Univ. of California Press., 1980.
25. Levashov P. R., Khishchenko K. V., Lomonosov I. V., Fortov V. E. Database on shock-wave experiments and equations of state available via Internet // AIP Conf. Proc. — 2004. — V. 706, N 1. — P. 87–90. — DOI: 10.1063/1.1780190.
26. Альтшуллер Л. В., Трунин Р. Ф., Симаков Г. В. Ударное сжатие периклаза и кварца и состав нижней мантии Земли // Изв. АН СССР. Сер. Физика Земли. — 1965. — Т. 29, № 10. — С. 1–6.
27. Srivastava S. K., Sharma S. K., Vinod K., Malik V. S. Entropy of MgO based on the Stacey equation of state // J. Phys. Chem. Solids. — 2008. — V. 69, N 4. — P. 1029–1032. — DOI: 10.1016/j.jpcs.2007.10.005.
28. Jin K., Li X., Wu Q., Geng H., Cai L., Zhou X., Jing F. The pressure-volume-temperature equation of state of MgO derived from shock Hugoniot data and its application as a pressure scale // J. Appl. Phys. — 2010. — V. 107, N 11. — 113518. — DOI: 10.1063/1.3406140.
29. Dorogokupets P. I., Oganov A. R. Ruby, metals, and MgO as alternative pressure scales: A semiempirical description of shockwave, ultrasonic, X-ray, and thermochemical data at high temperatures and pressures // Phys. Rev. B. — 2007. — V. 75, N 2. — 024115. — DOI: 10.1103/PhysRevB.75.024115.
30. Vassiliou M. S., Ahrens T. J. Hugoniot equation of state of periclase to 200 GPa // Geophys. Res. Lett. — 1981. — V. 8, N 7. — P. 729–732. — DOI: 10.1029/GL008i007p00729.
31. Utsumi W., Weidner D. J., Liebermann R. C. Volume measurement of MgO at high pressures and high temperatures // Geophys. Monogr. Ser. — 1998. — V. 101. — P. 327–333.
32. Fei Y. Effects of temperature and composition on the bulk modulus of (Mg,Fe)O // Am. Mineral. — 1999. — V. 84, N 3. — P. 272–276. — DOI: 10.2138/am-1999-0308.
33. Dewaele A., Fiquet G., Andrault D., Hausermann D. P-V-T equation of state of periclase from synchrotron radiation measurements // J. Geophys. Res. — 2000. — V. 105, B2. — P. 2869–2877. — DOI: 10.1029/1999JB900364.
34. Speziale S., Zha C. S., Duffy T. S., Hemley R. J., Mao H. Quasi-hydrostatic compression of magnesium oxide to 52 GPa: Implications for the pressure-volume-temperature equation of state // J. Geophys. Res. — 2001. — V. 106, B1. — P. 515–528. — DOI: 10.1029/2000JB900318.

35. **Zha C. S., Mao H., Hemley R. J.** Elasticity of MgO and a primary pressure scale to 55 GPa // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. — 2000. — V. 97, N 25. — P. 13494–13499. — DOI: 10.1073/pnas.240466697.
36. **Li B., Woody K., Kung J.** Elasticity of MgO to 11 GPa with an independent absolute pressure scale: Implications for pressure calibration // J. Geophys. Res. — 2006. — V. 111, B11. — B11206. — DOI: 10.1029/2005JB004251.
37. **Oganov A. R., Dorogokupets P. I.** All-electron and pseudopotential study of MgO: Equation of state, anharmonicity, and stability // Phys. Rev. B. — 2003. — V. 67, N 22. — 224110. — DOI: 10.1103/PhysRevB.67.224110.
38. **Wu Z., Wentzcovitch R. M., Umemoto K., Li B., Hirose K., Zheng J.-C.** Pressure-volume-temperature relations in MgO: An ultrahigh pressure-temperature scale for planetary sciences applications // J. Geophys. Res. — 2008. — V. 113, B6. — B06204. — DOI: 10.1029/2007JB005275.
39. **Физические величины: справочник** / под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. — М.: Энергоатомиздат, 1991.
40. **Таблицы физических величин: справочник** / под ред. И. К. Кикоина. — М.: Атомиздат, 1976.
41. **Фокин Л. Р., Кулямина Е. Ю., Зицерман В. Ю.** Энтропийный предвестник фазового перехода B1–B2 кристаллического оксида магния при 300 К // Журн. физ. химии. — 2020. — Т. 94, № 11. — С. 1583–1588. — DOI: 10.31857/S0044453720110072. — EDN: IHVBHBL.
42. **Cynn H., Anderson O. L., Isaak D. G., Nicol M.** Grueneisen ratios of MgO from the calculation of entropy // J. Phys. Chem. — 1995. — V. 99, N 19. — P. 7813–7818. — DOI: 10.1021/J100019A071.
43. **Sharma S. K., Sharma B. K., Kumar R., Sharma B. S.** Entropy for periclase at high compressions and at high temperatures // Mod. Phys. Lett. B. — 2011. — V. 25, N 28. — P. 2183–2191. — DOI: 10.1142/S0217984911027352.
44. **Гуревич Л. В., Вейц И. В., Медведев В. А. и др.** Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Т. III, кн. 1. — М.: Наука, 1981.
45. **Экспериментальные методы и средства в физике экстремальных состояний вещества: монография** / под ред. Р. И. Илькаева, А. Л. Михайлова, М. В. Жерноклетова. — М.: РАН, 2021.
46. **Compendium of Shock Wave Data** / M. van Thiel (Ed.) — Livermore: Lawrence Livermore Lab. Rep. UCRL-50108, 1977.
47. **Miyanishi K., Tange Y., Ozaki N., Kimura T., Sano T., Sakawa Y., Tsuchiya T., Kodama R.** Laser-shock compression of magnesium oxide in the warm-dense-matter regime // Phys. Rev. E. — 2015. — V. 92, N 2. — 023103. — DOI: 10.1103/PhysRevE.92.023103.
48. **Renero C., Prieto F. E.** Shock induced temperature in MgO, Ag, and Ta // Shock Waves. — 1992. — V. 2. — P. 201–202. — DOI: 10.1007/BF01414642.
49. **Dziewonski A. M., Anderson D. L.** Preliminary reference Earth model // Phys. Earth Planet. Inter. — 1981. — V. 25, N 4. — P. 297–356. — DOI: 10.1016/0031-9201(81)90046-7.
50. **Svendsen B., Ahrens T. J.** Shock-induced temperatures of MgO // Geophys. J. Int. — 1987. — V. 91, N 3. — P. 667–691. — DOI: 10.1111/j.1365-246X.1987.tb01664.x.

Поступила в редакцию 08.12.2022.

После доработки 01.02.2023.

Принята к публикации 01.03.2023.