

ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЕ ϵ -Fe ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ СТУПЕНЧАТОГО УДАРНОГО СЖАТИЯ

© 2023 г. А. М. Молодец¹, *, А. А. Гольшев¹

¹Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка, Россия

*E-mail: molodets@icp.ac.ru

Поступила в редакцию 10.07.2022 г.

После доработки 23.10.2022 г.

Принята к публикации 23.11.2022 г.

Проведены *in situ* измерения электросопротивления сжатых и разогретых в процессе ступенчатого ударного нагружения образцов железа с гексагональной плотноупакованной решеткой (ϵ -Fe). Построены уравнения состояния ϵ -Fe. Выполнено математическое моделирование полученных экспериментальных результатов в рамках гидрокда, опирающегося на разработанные уравнения состояния. Моделирование позволило реконструировать объемно-температурную зависимость удельного электросопротивления ϵ -Fe при давлениях ≈ 20 –70 ГПа и температурах ≈ 750 –950 К. Выполнены расчеты объемно-температурной зависимости коэффициента теплопроводности ϵ -Fe с использованием закона Видемана–Франца. Полученные результаты по электро- и теплопроводности ударно сжатого и разогретого ϵ -Fe сопоставлены с литературными экспериментальными и теоретическими данными для железа и кремнистого железа.

Ключевые слова: железо, электропроводность, теплопроводность, высокие давления, уравнения состояния, фазовая диаграмма, ударные волны.

DOI: 10.31857/S0002333723040087, **EDN:** TLSYVS

ВВЕДЕНИЕ

Сейсмологические наблюдения и теплофизические свойства геофизических материалов при высоких давлениях и температурах (P - T) свидетельствуют в пользу того, что внутренние ядра Земли в основном состоят из железного сплава, содержащего ≈ 85 % железа, ≈ 5 % никеля и ≈ 10 % некоторых легких элементов – кремния, углерода и др. Поэтому понимание теплового состояния ядра, а также генерации и эволюции магнитного поля Земли во многом зависят от достоверности сведений об электрофизических свойствах железных композиций и в первую очередь чистого железа (см. [Жарков, 2012; Hirose et al., 2021; Zhang et al., 2022] и ссылки в них).

Значения давления и температуры глубинных слоев Земли составляют сотни гигапаскалей и тысячи градусов и на фазовой диаграмме железа располагаются в области существования сжатой и разогретой ϵ -Fe фазы железа с гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решеткой. В связи с этим исследованию разнообразных свойств сжатого и разогретого ϵ -Fe железа, в том числе его электрофизических свойств, при высоких давлениях и температурах посвящена обширная научная литература.

Зависимость удельного электросопротивления ϵ -Fe железа $\rho = \rho(P, T)$ от давления P и температуры T в диапазоне давлений до 200 ГПа и температур до 3000 К измерялась как в условиях гидростатического сжатия, так и в условиях ударно-волнового нагружения. Большинство измерений электропроводности разогретого ϵ -Fe железа выполнено в статических условиях гидростатического сжатия алмазных наковален с внешним лазерным подогревом (см. [Seagle et al., 2013; Gomi et al., 2013; Zhang et al., 2020; 2022] и ссылки в них).

Электросопротивление *in situ* ударно-сжатого и ударно-разогретого ϵ -Fe железа исследовалось в работах [Keeler, Mitchel 1969; Vi et al., 2002]. Ударно-волновые данные могут дополнить гидростатические данные по ряду позиций. Во-первых, при микросекундных временах ударно-волнового нагружения уменьшаются паразитные эффекты, связанные с возможными (см., например, [Basu et al., 2020; Yang et al., 2022]) химическими реакциями горячего железа с окружающими материалами измерительных ячеек статических прессов. Кроме этого, при плоском одномерном ударно-волновом сжатии надежно учитывается изменение геометрических размеров образцов, необходимое для перехода к удельным величинам электросопротивления. Наконец, при одних и тех

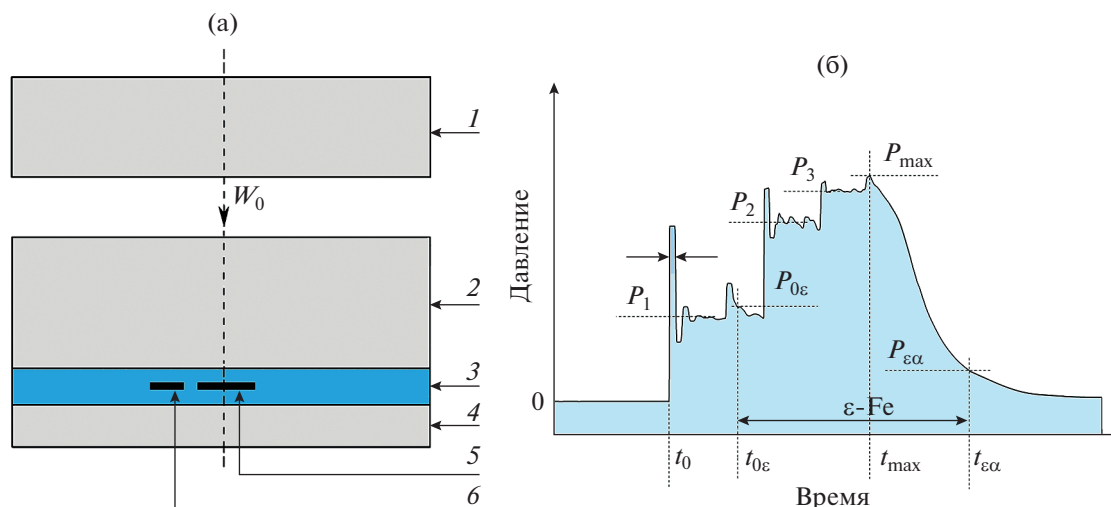


Рис. 1. Генератор ступенчатого ударного нагружения (а); профиль (зависимость от времени) давления в исследуемом образце при измерении его электросопротивления (б); (а) 1 – дискообразный стальной (сталь 12Х18Н10Т) ударник толщиной 3.5 мм, разогнанный продуктами взрыва до скорости $W_0 = 2.6(1)$ км/с; 2 – стальная пластина толщиной 3.45(1) мм; 3 – изолирующий материал (тефлоновые пленки, склеенные вакуумной смазкой) толщиной $h_0 = 2.45(1)$ мм; 4 – тонкая стальная пластина толщиной 1.85 мм; 5 – исследуемый железный образец; 6 – чувствительный элемент манганинового датчика давления (5 и 6 расположены в одной плоскости); (б) – пояснение обозначений в тексте.

же температурах и давлениях не исключено различие электрофизических свойств образца, разогреваемого ударным сжатием и сжатого образца статически разогретого.

Измерения электросопротивления образцов при плоском ударно-волновом нагружении чаще всего производятся с использованием фольговых образцов в окружении изоляционного материала с отличающейся динамической жесткостью. Поэтому ударно-волновое сжатие образцов происходит в режиме так называемого ступенчатого ударного сжатия, в котором осуществляется непрерывное сжатие лагранжевой частицы материала последовательными ударными волнами (см. [Набатов и др., 1979; Ададулов, 1986] и ссылки в них).

Применение ступенчатого ударного сжатия подобно постепенному динамическому сжатию (ramp compression [Remington et al., 2015]) обеспечивает выбор обширных областей фазовой диаграммы железа в окрестности ударной адиабаты однократного сжатия. Наряду с этим конструктивные возможности схемы ступенчатого ударного сжатия позволяют целенаправленно варьировать параметры режима нагружения в нужных пределах. Так, в тонком образце при определенном соотношении толщин образца и динамических жесткостей материалов экспериментальной сборки реализуется ступенчато-циклический режим сжатия с высокочастотной составляющей давления на каждой ступени [Молодец и др., 2021]. В рамках этой схемы удается измерить электросопротивление образца в протяженной области давлений и температур в единственном

ударно-волновом эксперименте, что делает его предпочтительным в задачах детализации электрофизических свойств материалов в условиях сильного динамического сжатия.

Физическая интерпретация экспериментальных результатов по электропроводности ударно-сжатых образцов требует знания уравнения состояния и возможности моделирования электрофизических и термодинамических свойств исследуемого материала в условиях проведенного эксперимента. Современные компьютеры и вычислительные методы позволяют рассчитывать термодинамические и электрофизические свойства сжатого железа из первых принципов (см. [Vocadlo, 2007] и ссылки на нее). Однако результаты сложных первопринципных расчетов имеют вид цифровых массивов, которые отделены от исходных физических предпосылок нетривиальными численными процедурами. В такой ситуации оптимальным вариантом является полумпирическое описание электрофизических и термодинамических свойств железа (см., например, [Seagle et al., 2013; Vi et al., 2002]), которое оказывается удобным для использования в гидрочодах и одновременно предоставляет точное описание свойств ϵ -железа за счет набора свободных параметров в физически обоснованных математических соотношениях.

В данной статье представлены результаты измерения электросопротивления образцов ϵ -Fe при ступенчато-циклическом ударном сжатии до давлений 70 ГПа, а также модифицированное описание полученных экспериментальных ре-

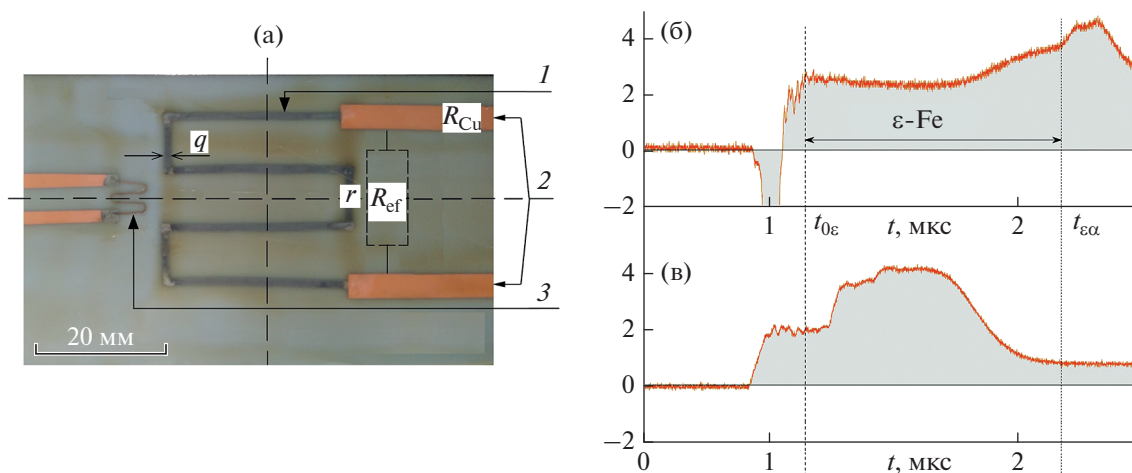


Рис. 2. Чувствительные элементы лентообразных датчиков (а) и их первичные сигналы (б), (в): (а) – измерительная ячейка датчика магнитного превращения; 1 – чувствительный элемент используемого датчика толщиной $h_0 = 60$ мкм и шириной $q = 1$ мм; 2 – медные тоководы толщиной 30 мкм; 3 – марганцевый датчик давления толщиной 60 мкм; (б) и (в) – первичные сигналы датчиков соответственно 1 и 3 в виде профилей электрического напряжения $U(t)$.

зультатов на основе полуэмпирических моделей электро- и теплофизического поведения железа из работы [Seagle et al., 2013; Молодец, Голышев, 2021].

ОБРАЗЦЫ, СТУПЕНЧАТО-ЦИКЛИЧЕСКОЕ УДАРНОЕ НАГРУЖЕНИЕ И РЕГИСТРАЦИЯ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ УДАРНО-СЖАТЫХ ОБРАЗЦОВ ЖЕЛЕЗА

Исследуемые образцы изготавливались из фольги железа АРМКО. Согласно ГОСТ 11036-75 железо АРМКО содержит примеси в массовых процентах не более, чем 0.035% С, 0.3% Mn, 0.3% Si, 0.020% P, 0.030% S, 0.3% Cu. Измеренные удельное электросопротивление и плотность образцов составляли соответственно величины 10.05(5) мОм·см и 7.85(3) г/см³, характерные для α -Fe фазы (железа с объемно-центрированной кубической решеткой (ОЦК)) при комнатной температуре и атмосферном давлении. На рис. 1а представлена схема используемого генератора ступенчатого ударного нагружения в согласии с [Молодец и др., 2021]. Здесь плоский металлический ударник 1 соударяется со слоистой мишенью 2–4, состоящей из двух стальных пластин 2 и 4 и зажатого между ними слоя-изолятора (тефлона) 3. После соударения в пластине 2 формируется однократный ударно-волновой импульс, фронт которого в слое 3 приобретает ступенчатую форму в виде увеличения давления P_1, P_2, P_3 (см. рис. 1б). Эта трансформация обуславливается реверберацией волны сжатия в “мягком” тефлоне 3 между двумя “жесткими” стальными пластинами 2 и 4.

Исследуемый лентообразный железный образец 5 и лентообразный марганцевый датчик 6

(фотографии марганцевого датчика и образца приведены на рис. 2а) располагаются в середине слоя 3. Поочередный приход каждой ступени P_1, P_2, P_3 на датчики 5 и 6, также стимулирует в них реверберации затухающих волн сжатия и разгрузки. Этот процесс иллюстрируется в виде высокочастотной циклической составляющей давления на фронтах ступеней P_1, P_2, P_3 на рис. 1б. Фаза ступенчатого ударного сжатия заканчивается достижением в момент t_{max} максимального давления P_{max} , после чего начинается плавное уменьшение давления вплоть до нулевых значений, обусловленных в основном приходом волны разгрузки со свободной поверхности тонкой пластины 4. Отметим, что полупериод циклической составляющей τ_0 на фронтах ступеней P_1, P_2, P_3 составляет величину порядка $\tau_0 \sim h_0/C_0$, где h_0 – толщина датчика, C_0 – скорость звука в материале датчика, что при типичных для металла значениях $h_0 \sim \approx 0.05$ мм и $C_0 \approx 5$ мм/мкс дает $\tau_0 \approx 0.01$ мкс.

Таким образом, используемый генератор ступенчатого ударного нагружения стимулирует в железном образце 5 специфический режим нагружения, состоящий из “ступенчато-циклической” фазы сжатия до давлений P_{max} и последующей фазы плавного уменьшения давления.

Измерение электросопротивления образца 5, состоящего из ударно-сжатого ϵ -Fe железа, осуществляется при условии, что величина P_{max} превышает значения $P_{0\epsilon}$ и $P_{\epsilon\alpha}$, где соответственно $P_{0\epsilon}$ – давление завершения прямого и $P_{0\epsilon}$ – давление начала обратного полиморфных переходов α -Fe фазы в ϵ -Fe фазу. Действительно, в этом случае в процессе ударно-волнового сжатия железного образца можно выделить интервал $t_{0\epsilon} < t < t_{\epsilon\alpha}$ су-

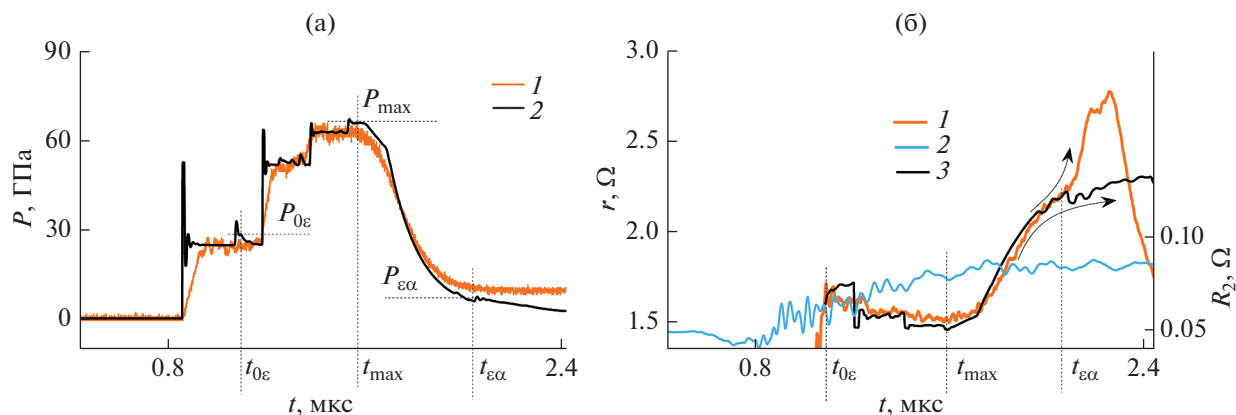


Рис. 3. Экспериментальные и модельные профили давления и электросопротивления. (а): 1 – профиль давления, полученный в результате обработки показаний манганинового датчика, 2 – расчетный профиль давления в железном образце (смысл обозначений $t_{0\epsilon}$, t_{\max} , $t_{\epsilon\alpha}$, $P_{0\epsilon}$, P_{\max} , $P_{\epsilon\alpha}$ тот же, что и на рис. 1б); (б): 1 – скорректированный профиль электросопротивления $r = r(t)$ исследуемого ϵ -Fe железного образца; 2 – профиль электросопротивления измерительной ячейки рис. 2а, в которой железный образец 1 заменен медным аналогом; 3 – расчетный профиль $r = r(t)$ электросопротивления в ϵ -Fe железном образце (левая ордината r для 1 и 3, правая R_2 – для 2).

существования ϵ -Fe железа, как это схематически показано на рис. 1б.

Определение интервала $t_{0\epsilon} < t < t_{\epsilon\alpha}$ и измерение профиля электросопротивления $R(t)$ железного образца осуществлялось с использованием измерительной ячейки из работы [Молодец и др., 2021], фотография которой, как упоминалось, представлена на рис. 2а. Здесь в процессе ступенчатого ударного нагружения через железный образец 1 и манганиновый датчик 3 пропускаются токи известной амплитуды, что позволяет по измеренному падению напряжения $U(t)$ определить изменение их электросопротивлений $R(t)$.

Результат единичного эксперимента показан на рис. 2б и 2в в виде первичных профилей $U(t)$ (t – время) от датчиков 1 и 3 соответственно. При этом согласно работе [Молодец et al., 2021] осциллограмма датчика 1 на рис. 2б содержит сигналы о полиморфном превращении. Эти сигналы возникают в виде отрицательного отброса в области $t_{0\epsilon}$ и в виде положительного отброса в момент $t_{\epsilon\alpha}$. Отметим, что осциллограмма 1 на рис. 2б является одной из трех совпадающих в пределах 3% осциллограмм в трех идентичных экспериментах. Таким образом, на осциллограммах рис. 2б оказывается возможным вычленить интервал времени $t_{0\epsilon} < t < t_{\epsilon\alpha}$ существования ϵ -Fe фазы для определения первичного профиля $R_1 = R_1(t)$ электросопротивления ϵ -Fe железного образца в выполненных ударно-волновых экспериментах.

Манганиновый датчик 3 имеет такую же толщину и располагается в одной и той же плоскости, что и датчик 1. Поэтому его электросопротивление изменяется синхронно с изменением электросопротивления образца, а первичный

сигнал $U(t)$ манганинового датчика на рис. 2в, будучи пересчитанным в давление, практически совпадает с амплитудами ступеней ударного сжатия и разгрузки в образце 1. На рис. 3а цифрой 1 обозначен профиль $P(t)$ в типичном эксперименте.

Вместе с тем следует отметить, что на экспериментальном профиле 1 отсутствует высокочастотная циклическая составляющая на ступенях давления. Это несоответствие может быть обусловлено двумя причинами. Первая причина – это ограниченные частотные характеристики манганиновой методики, которые не позволяют регистрировать сигналы длительностью $\tau_0 \approx 0.01$ мкс. Наряду с этим, определенный вклад в уменьшение первичного сигнала манганинового датчика может вносить и составляющая температурной зависимости электросопротивления манганина. В этой связи экспериментальный график давления 1 на рис. 3а используется только для оценки давления на плато ступеней профиля $P(t)$, а также в качестве отметчика времени прихода ударно-волновых возмущений в плоскость расположения датчиков.

Что же касается железного образца, то в дальнейшем профиль давления в образце рассчитывался в рамках гидрокода, использующего разработанные уравнения состояния, представленные ниже. Рассчитанный профиль железного образца показан графиком 2 на рис. 3а, где $P_{\max} = 67$ ГПа. Как видно расчетный профиль 2 содержит все особенности схематического профиля давления рис. 1б.

Таким образом, используемая методика позволяет вычленить интервал времени существования ϵ -Fe для изучения его электрофизических

свойств в условиях высоких давлений ступенчато-циклической фазы сжатия до давлений P_{\max} и последующей плавной разгрузки.

УЧЕТ ОСЛОЖНЯЮЩИХ ЭФФЕКТОВ ПРИ ИЗМЕРЕНИИ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ УДАРНО-СЖИМАЕМЫХ ЖЕЛЕЗНЫХ ОБРАЗЦОВ

Заметим, что вышеописанная методика содержит ряд особенностей, осложняющих анализ результатов измерений. Действительно, при высоких давлениях ударного сжатия изолятор может терять свои изоляционные свойства и в той или иной мере шунтировать образец. Один из способов уменьшить эффект шунтирования железного образца применен в работе [Vi et al., 2002], где использован стойкий изолятор из корунда. В нашей работе шунтирование электросопротивления r железного образца изоляционной ТВС средой заведомо имело место. Во-вторых, измеренное электросопротивление образца по используемой двухточечной схеме содержит “паразитное” электросопротивление медных выводов R_{Cu} .

Учет этих обеих поправок производился следующим образом. В эксперименте с железным образцом первичный профиль $R_1 = R_1(t)$, полученный пересчетом осциллограммы $U(t)$, приравнивался величине $R_1 = 2R_{Cu} + rR_{ef}/(r + R_{ef})$. В этом выражении смысл слагаемых и сомножителей поясняется на рис. 2а: R_{Cu} – “паразитное” электросопротивление одного медного токовода, r – электросопротивление железного образца, R_{ef} – эффективное электросопротивление изоляционной ТВС среды, подключенное параллельно к r . Затем привлекались результаты идентичного эксперимента, в котором железный образец, заменялся медной лентой, имеющей электросопротивление r_c . Соответственно, в эксперименте с медной лентой измеренный профиль $R_2 = R_2(t)$ приравнивался величине $R_2 = 2R_{Cu} + r_c R_{ef}/(r_c + R_{ef})$. После исключения электросопротивления медных выводов R_{Cu} из двух выражений для R_1 и R_2 , можно записать:

$$r = R_{ef} \left(\Delta R + \frac{r_c R_{ef}}{r_c + R_{ef}} \right) \left(R_{ef} - \left(\Delta R + \frac{r_c R_{ef}}{r_c + R_{ef}} \right) \right)^{-1},$$

где $\Delta R = R_1 - R_2$.

Заметим, что полученное выражение для r можно упростить. Действительно, согласно работе [Гольшев, Молодец, 2013] зависимость эффективного электросопротивления изоляционной ТВС среды R_{ef} от давления P может быть представлено в виде $R_{ef} = 4.38P^{47.07/P}$, где R_{ef} и P имеют размерности соответственно Ом и ГПа. При максимальных давлениях ≈ 70 ГПа, реализуемых в

проведенных экспериментах, эффективное электросопротивление изоляции составляло $R_{ef} \approx 75$ Ом. Наряду с этим эксперименты с железным образцом и с медной лентой свидетельствуют, что значения $R_2 \ll R_1$ и $R_2 < 0.1$ Ом (см. профиль 2 на рис. 3б). Поскольку очевидно, что $r_c < R_2$, то в целом $r_c \ll R_{ef}$, $r_c \ll \Delta R$ и, следовательно,

$$r \cong \frac{R_{ef} \Delta R}{R_{ef} - \Delta R}. \tag{1}$$

Скорректированный в соответствии с (1) профиль электросопротивления $r = r(t)$ исследуемого ϵ -Fe образца показан на рис. 3б графиком 1.

Отметим также, что в качестве источника тока в работе [Молодец и др., 2021] используется конденсатор емкостью $C = 1000$ мкФ, разряжающийся через сопротивление $R \approx 100$ Ом. Поэтому фактически через образец протекает переменный ток с частотой порядка $\omega \sim 2\pi/(RC)$. Оценим величину скин-эффекта для этой частоты в проведенных экспериментах. Поскольку толщина $h_0 = 60$ мкм железного образца l значительно меньше его ширины $q = 1$ мм (см. рис. 2а), то образец можно рассматривать как пластину и применить к нему хорошо известную формулу для глубины $d = (0.5\omega\mu_0/\rho)^{-1/2}$ проникновения тока в плоском слое. Здесь: μ – магнитная проницаемость вещества образца; μ_0 – магнитная постоянная; ρ – удельное электросопротивление. Воспользовавшись характерными значениями $\mu \approx 5000$ и $\rho \approx 10$ мкОм · см для железа, получим оценку $d \approx 700$ мкм. Таким образом, в проведенных экспериментах имело место соотношение $d \gg h_0$, что означает малость скин-эффекта с практически постоянной плотностью тока по сечению исследуемого железного образца.

Наконец оценим еще один фактор возможных искажений результатов в проведенных экспериментах по измерению электропроводности образца в окружении тефлоновой изоляции. Вообще говоря, не исключена деструкция ударно-сжатого тефлонового изолятора с выделением фтора и последующего образования пленки фторида железа на поверхности железного образца. Однако оценка толщины пленки δ по формуле $\delta^2 \sim Dt_d$ при величине коэффициента диффузии $D \sim 10-12$ м²/с за микросекундные времена t_d ударно-волнового эксперимента составляет тысячные доли микрона. Малость величины δ по сравнению с толщиной h_0 исследуемых образцов позволяет пренебречь соответствующим возможным вкладом в измеряемое электросопротивление $r = r(t)$.

Как отмечалось во ВВЕДЕНИИ, физическая интерпретация экспериментальных результатов в форме профилей электросопротивления $r = r(t)$ (1) требует знания уравнения состояния ϵ -Fe фа-

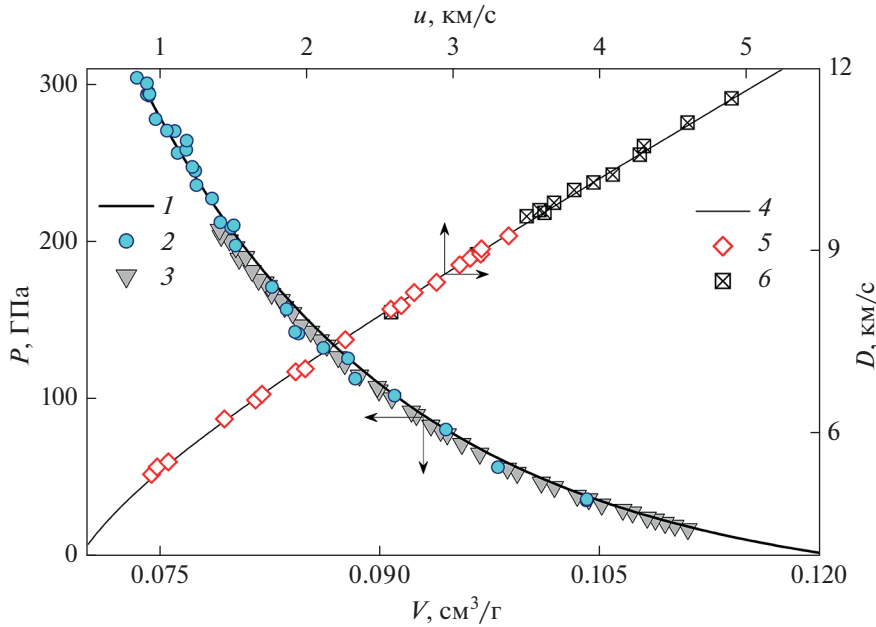


Рис. 4. Расчетные и экспериментальные результаты ударного и статического сжатия ϵ -Fe фазы железа: 1 – расчетная комнатная изотерма в координатах давление P – объем V ; 2 и 3 – экспериментальные комнатные изотермы соответственно из работ [Mao et al., 1990; Dewaele et al., 2006]; 4 – расчетная ударная адиабата однократного сжатия в координатах скорость ударной волны D – массовая скорость u ; 5 – уточненные экспериментальные данные взрывных экспериментов (см. [Brown et al., 2000]), 6 – экспериментальная ударная адиабата, определенная с использованием двухступенчатой легкогазовой пушки соответственно [Brown et al., 2000].

зы железа и возможности моделирования электрофизических и термодинамических свойств исследуемого материала в условиях проведенного эксперимента. Уравнения состояния ϵ -Fe фазы железа и моделирование полученных экспериментальных данных представлено в нижеследующих двух разделах статьи.

УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ϵ -Fe ЖЕЛЕЗА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И ТЕМПЕРАТУРАХ

Термодинамическое состояние ϵ -Fe фазы железа рассчитывалось с использованием уравнения состояния (УРС) α -Fe фазы из работы [Молодец, Голышев, 2021] и специально построенного для целей данной работы УРС ϵ -Fe фазы. Уравнения состояния находились с помощью частных производных полумпирического выражения для свободной энергии всесторонне сжатого изотропного твердого тела $F = F(V, T)$. Термическое уравнение состояния (зависимость давления P от объема и температуры T) определяется частной производной свободной энергии по объему $P = P(V, T) = -\partial F/\partial V$. Калорическое уравнение состояния (зависимость внутренней энергии E от объема и температуры) определяется частной производной свободной энергии по температуре $E = F - T(\partial F/\partial T)$. Техника построения УРС и формульный вид используемых базовых выражений для свободной энергии в виде:

$$F = 3R \left[\frac{\Theta}{2} + T \ln \left(1 - \exp \left(-\frac{\Theta}{2} \right) \right) \right] + E_x + E_m, \quad (2)$$

где: R – удельная газовая постоянная, а ключевые функции $\Theta = \Theta(V)$ – характеристическая температура Эйнштейна и $E_x = E_x(V)$ – потенциальная энергия – аналогичны таковым из работы [Молодец и др., 2017] (см. также [Молодец, 2022]), E_m – разность между потенциальными энергиями α -Fe и ϵ -Fe фазами железа. Так, выражение для $\Theta = \Theta(V)$ имеет вид:

$$\Theta = \Theta_0 \left(\frac{v_0 - V}{v_0 - V_0} \right)^2 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3}. \quad (3)$$

В (3) параметр v_0 , имеющий смысл характеристического объема, определяется соотношением:

$$v_0 = V_0 \left(\frac{3\gamma_0 + 4}{3\gamma_0 - 2} \right), \quad (4)$$

где $\gamma_0 = \gamma_0(V_0, T_0)$ термодинамический параметр Грюнайзена при начальном удельном объеме V_0 , начальной комнатной температуре $T_0 = 298.15$ К и начальном атмосферном давлении P_0 . Соответственно параметр Θ_0 представляет собой начальное значение характеристической температуры $\Theta_0 = \Theta(V_0)$.

Выражение для $E_x = E_x(V)$ имеет вид:

$$E_x = -v_x (C_1 H_x + C_2 x) + C_3, \quad (5)$$

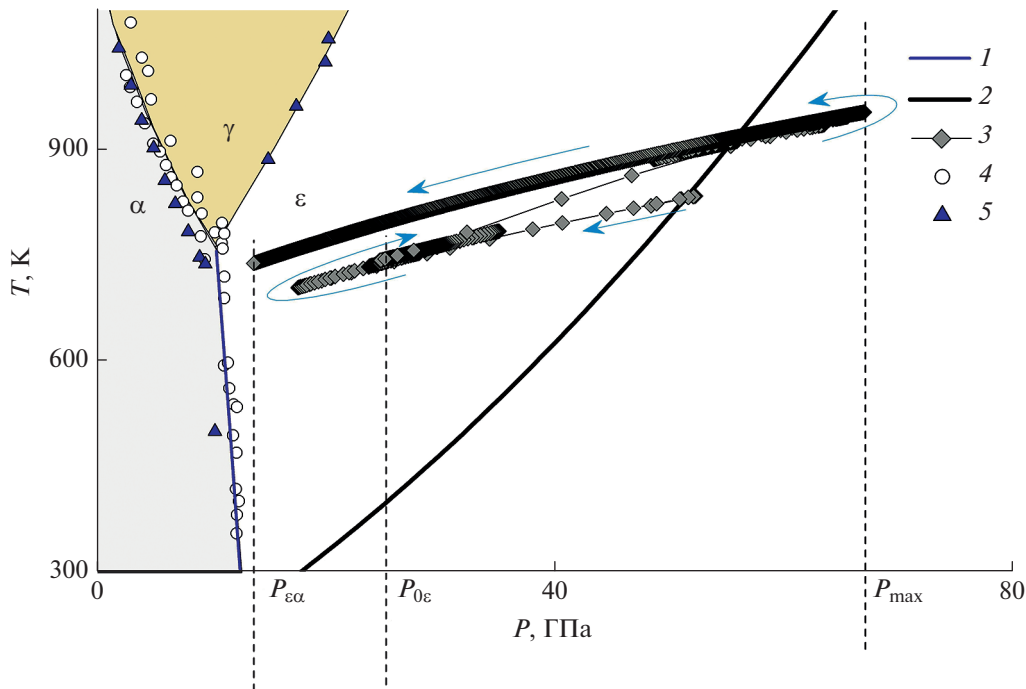


Рис. 5. Исследованная область на фазовой диаграмме железа в координатах давление P – температура T : 1 – авторский расчет линии равновесия между α -железом и ϵ -железом; 2 – расчетная температура вдоль ударной адиабаты ϵ -Fe фазы железа; 3 – расчетная фазовая траектория ступенчатого ударного нагружения ϵ -Fe фазы в проведенных экспериментах (стрелки указывают последовательность состояний во времени); 4 и 5 – литературные экспериментальные точки линии равновесия между фазами железа, взятыми из работ [Johnson, 1962; Kerley, 1993]; смысл обозначений $P_{\epsilon\alpha}$, $P_{0\epsilon}$ и P_{max} тот же, что и на рис. 3а.

$$H_x = 9x^3 \left(\frac{1}{10}x^{-1} + 2 + \frac{3}{2}x - \frac{1}{7}x^2 + \frac{1}{70}x^3 \right), \quad (6)$$

$$x = \frac{V}{v_x}.$$

В таблице приведены параметры свободной энергии (2) для α -Fe и для ϵ -Fe фаз железа, используемые в данной работе.

Адекватность УРС α -Fe фазы железа обсуждалась в работе [Молодец, Голышев, 2021]. На рис. 4 представлены расчеты 1 и 4 для ϵ -Fe, полученные с использованием (2) и данных таблицы. Как видно, наши расчеты для ϵ -Fe также удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными как при статическом [Мао et al., 1990; Dewaele et al., 2006], так и при ударно-волновом сжатии [Brown et al., 2000].

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ И ОБЪЕМНО-ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ ϵ -Fe ЖЕЛЕЗА В ПРОВЕДЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАХ

Разработанные УРС фаз железа позволяют рассчитывать термодинамические свойства желе-

за в обширных областях его фазовой диаграммы и моделировать термодинамическое состояние железных образцов в проведенных экспериментах. Так, на рис. 5 представлена рассчитанная с использованием (2) и табл. 1 линия равновесия 1 между α -Fe и ϵ -Fe фазами железа, а также температура 2 вдоль ударной адиабаты однократного сжатия ϵ -Fe фазы железа.

Моделирование термодинамического состояния железных образцов в проведенных экспериментах осуществлялось в программе СТАГ для ЭВМ [Ким, Молодец, 2016]. Эта программа позволяет рассчитывать волновые взаимодействия и термодинамические состояния в форме профилей давления $P(t)$, температуры $T(t)$ и объема $V(t)$ для выбранных лагранжевых частиц ударника и каждого слоя многослойных мишеней рис. 1а при одномерном ударном нагружении. Теплообмен между слоями мишени в программе СТАГ не предусмотрен. Расчет профилей давления $P(t)$, температуры $T(t)$ и объема $V(t)$ в программе СТАГ производился с использованием авторских уравнений состояния материалов экспериментальной сборки. Поскольку ширина железного образца $q \approx 1$ мм на порядок больше его толщины $h_0 \approx 0.05$ мм, то в гидрочоде образец моделировался пластиной с начальной толщиной h_0 . Для железа использо-

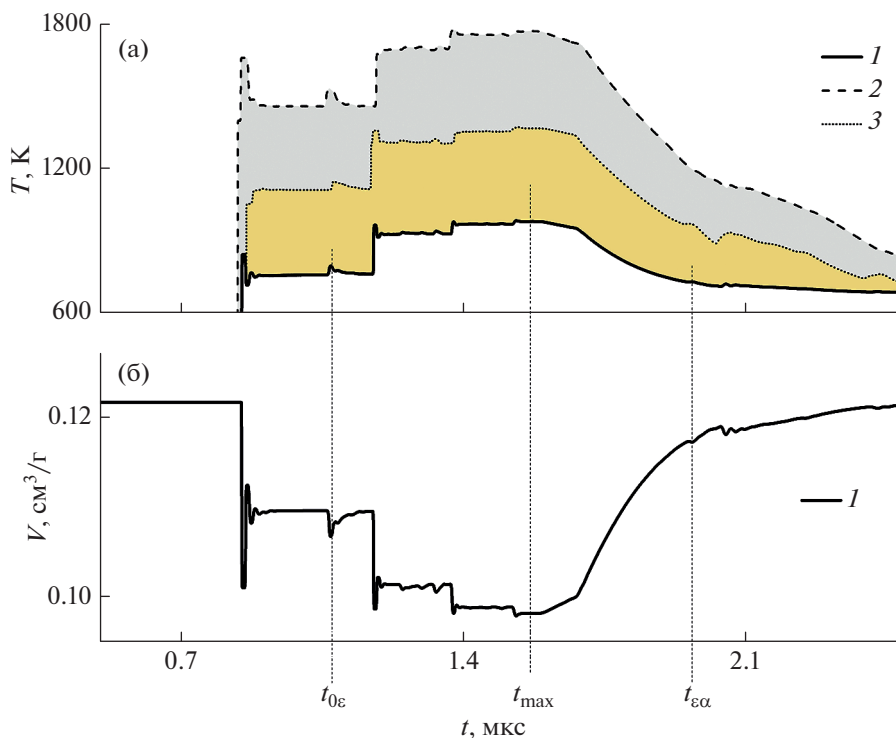


Рис. 6. Модельные профили температуры и удельного объема при ступенчатом ударно-волновом нагружении ϵ -Fe железного образца и тefлонового окружения. (а) – Профили температуры: 1 – профиль температуры в середине ϵ -Fe железного образца толщиной 60 мкм; 2 – профиль температуры в тefлоновой пленке перед образцом на расстоянии 30 мкм от поверхности образца; 3 – профиль температуры в тefлоновой пленке за образцом на расстоянии 30 мкм от поверхности образца; (б) – профиль удельного объема в середине ϵ -Fe железного образца толщиной 60 мкм.

вались УРС, приведенные выше, для нержавеющей стали УРС взято из работы [Молодец, 2015], для тefлона – из работы [Молодец и др., 2013].

Остановимся здесь на приемлемости расчета температуры ударно-сжимаемого образца в окружении ударно-разогретого изолятора. На рис. 6а показан модельный профиль температуры $T(t)$ 1 для середины ϵ -Fe железного образца. На этом же рисунке приведены расчетные профили температур 2 и 3 в “мягком” изоляторе соответственно перед и после образца. Как видно, при ударном сжатии “мягкий” изолятор разогревается существенно больше, чем “жесткий” образец. Иными словами, в проведенных экспериментах пластина железного образца оказывается зажатой между двух горячих слоев изолирующего тefлона. Поэтому очевидно, что пренебрежение теплообменом между образцом и изолятором приемлемо лишь при условии, что время эксперимента гораздо меньше времени разогрева τ пластинчатого железного образца до температуры T_τ окружающего изолятора. Рассчитаем τ , воспользовавшись общеизвестной формулой для оценки τ по порядку величины:

$$\tau \sim \frac{\delta^2}{a}. \quad (7)$$

В (7) δ – половина толщины пластины, $a = \delta k / C_p$ – коэффициент температуропроводности, где: V – удельный объем; k – коэффициент теплопроводности; C_p – изобарная теплоемкость. Оценку по (7) проведем с учетом изменения толщины пластины $\delta = 0.5h_0(V/V_0)$, удельного объема $V = V(t_{\max})$ и теплофизических свойств железа в условиях проведенного эксперимента при значениях давления $P_{\max} = 67$ ГПа в момент t_{\max} . Соответствующие значения составили $V = 5.691$ см³/моль (см. профиль 1 на рис. 6б), $V_{0\alpha} = 7.093$ см³/моль, $\delta = 24$ мкм, $C_p = 25.81$ Дж/моль·К. Для значения T_τ принята величина $T_\tau = T_\tau(t_{\max}) = 1375$ К, равная температуре тefлона за образцом (см. профиль 3 на рис. 6а). Для значения k принята величина коэффициента теплопроводности, разогретого до 1375 К ϵ -Fe железа при давлении 53 ГПа из работы [Hasegawa, 2019] равная $k = 47$ Вт/(м·К). Перечисленные величины дают оценку $\tau \sim 56$ мкс, что гораздо больше времени проведенного эксперимента, составляющей ≈ 1 мкс. Таким образом, соотношение между временем разогрева образца и временем проведенного эксперимента позволяет пренебречь теплообменом между образцом и изолятором и использовать получаемые профили температуры при анализе и моделировании полу-

Таблица 1. Параметры для свободной энергии (2) для α -Fe [Молодец, Голышев, 2021] и для ϵ -Fe фаз железа

Фаза	V_0 , см ³ /моль	Θ_0 , К	v_0 , см ³ /моль	v_x , см ³ /моль	C_1 , ГПа	C_2 , ГПа	C_3 , кДж/г	E_m , кДж/г
α -Fe	7.093	279.8	21.092	21.02	-144.5188	2971.046	-572.4635	0.0
ϵ -Fe	6.76 ^b	262.1	17.949	13.858	-724.8081	15070.4575	-1876.6370	0.8127

ченных экспериментальных данных для ϵ -Fe железа при ступенчатом ударном сжатии.

На рис. 6а показан модельный профиль I температуры $T(t)$ для середины ϵ -Fe железного образца. Пример расчетного профиля давления $P(t)$ ϵ -Fe железа приведен выше на рис. 3а. Исключенные времени из профилей $P(t)$ и $T(t)$ дают фазовую траекторию образца в координатах давление–температура, которая показана на рис. 5 графиком 3 и очерчивает область на фазовой диаграмме железа, в которой проведены измерения электросопротивления ϵ -железа в условиях ступенчатого ударного сжатия. Эту область можно охарактеризовать давлениями ≈ 20 –70 ГПа и температурами ≈ 750 –950 К. Как видно на рис. 3 фазовая траектория ступенчатого ударного сжатия 3 существенно отлична от ударной адиабаты однократного ударного сжатия ϵ -железа 2.

Рассчитанные профили температуры $T = T(t)$ и объема $V = V(t)$ использовались также для моделирования профиля электросопротивления образца $R = R(t)$ вдоль фазовой траектории ступенчатого ударного сжатия согласно формуле:

$$R = R_{0\alpha} \left(\frac{\rho(T, V)}{\rho_{0\alpha}} \right) \left(\frac{V_{0\alpha}}{V} \right). \quad (8)$$

В (8) индекс “0 α ” означает принадлежность свойства к α -железу при комнатной температуре и атмосферном давлении. Начальное сопротивление образца $R_{0\alpha}$ и его удельное электросопротивление $\rho_{0\alpha}$ измерялись перед экспериментом и составляли соответственно $R_{0\alpha} = 0.23(1)$ Ом и $\rho_{0\alpha} = 10.1(8)$ $\mu\text{Ом} \cdot \text{см}$. Последний сомножитель в скобках (8) учитывает изменение толщины образца при одномерном сжатии. Начальный удельный объем α -железа $V_{0\alpha}$ был равен $V_{0\alpha} = 7.093$ см³/моль.

Функция $\rho = \rho(T, V)$ в (8) представляет собой определяющее соотношение для объемно температурную зависимость удельного электросопротивления ϵ -железа в виде модифицированной функции объема и температуры из работы [Seagle et al., 2013]:

$$\rho = \rho_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^\alpha \left(\frac{V}{V_0} \right)^{n/3} \left(\frac{v_0 - V}{v_0 - V_0} \right)^{-2n}. \quad (9)$$

В (9) смысл определяющих параметров ρ_0 , α , n тот же, что и в прототипе [Seagle et al., 2013], а параметры v_0 и V_0 являются дополнительными параметрами в модификации [Молодец, Голышев, 2021]. Согласно [Молодец, Голышев, 2021] пара-

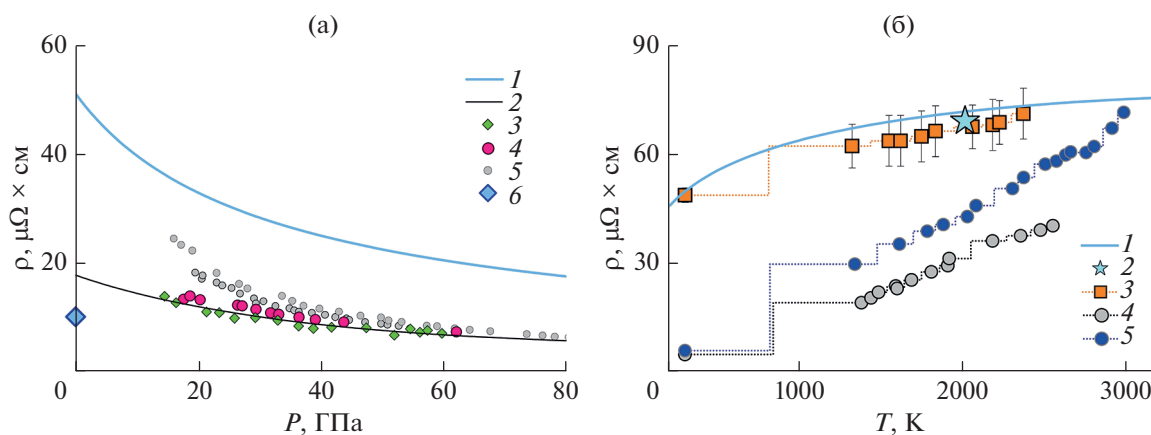


Рис. 7. Зависимость удельного электросопротивления ρ сжатого и разогретого ϵ -Fe железа от давления P и температуры T . (а): 1 – комнатная изотерма (9); 2 – подгоночная изотерма из работы [Seagle et al., 2013]; 3, 4, 5 – экспериментальные результаты соответственно из работ [Seagle et al., 2013; Zhang et al., 2020; Gomi et al., 2013]; 6 – начальное электросопротивление исследованных образцов железа АРМКО при комнатной температуре и атмосферном давлении; (б) – изобары при давлении 105 ГПа: 1 – расчётная изобара ϵ -Fe железа (9); 2 – ударно-волновой эксперимент [Bi et al., 2002]; 3 – экспериментальная изобара сплава ϵ -Fe железа с 4.3%Si из работы [Zhang et al., 2022]; 4 и 5 – экспериментальные изобары ϵ -Fe железа из работ [Ohta et al., 2016; Zhang et al., 2020], пунктирные линии – горизонтальный сплайн по точкам без учета разброса.

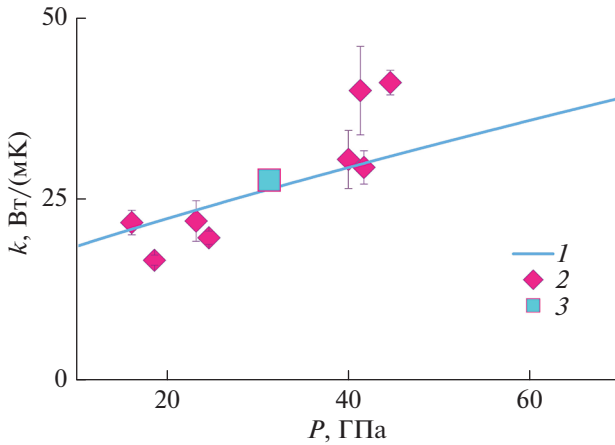


Рис. 8. Зависимость коэффициента теплопроводности k (11) от давления P для ϵ -Fe железа при постоянной температуре $T = 300$ К: 1 – комнатная изотерма (11); 2 – экспериментальные результаты из работы [Ohta et al., 2018]; 3 – средняя точка данных [Ohta et al., 2018].

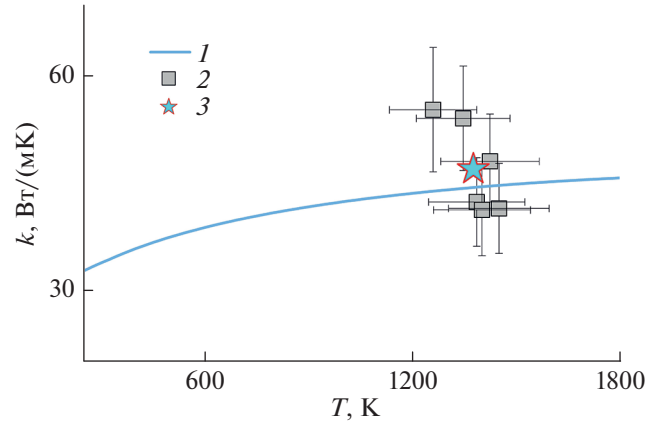


Рис. 9. Зависимость коэффициента теплопроводности k (11) от температуры T для ϵ -Fe железа при постоянном давлении $P = 53$ ГПа: 1 – изобара (11); 2 – экспериментальные результаты из работы [Hasegawa et al., 2019] в диапазоне 1200–1500 К; 3 – средняя точка данных [Hasegawa et al., 2019].

метры v_0 и V_0 являются одновременно и параметрами, задающими объемную зависимость характеристической температуры в формуле (3). Для ϵ -Fe параметры v_0 и V_0 брались из таблицы. Значение начального удельного электросопротивления ρ_0 при комнатной температуре и атмосферном давлении принято равным $\rho_0 = 51.0 \mu\text{Ом} \cdot \text{см}$ для метастабильного ϵ -Fe железа из работы [Gomi et al., 2013].

Заметим далее, что в интервале времен $t_{\max} < t < t_{\text{ex}}$ (см. рис. 6) зависимость температуры от объема $T = T(V)$ можно аппроксимировать монотонной квадратичной функцией $T(V) = A + BV + CV^2$ и стандартным образом определить коэффициенты A , B , C . Например, для конкретных модельных профилей рис. 6 $A = 3383.3$ К, $B = -626.16$ К/(см³/г), $C = 33.21$ К/(см³/г)². Эта возможность и соотношение (8) позволяют записать модельное соотношение для профиля электросопротивления образца $R = R(t)$ (8) как

$$R = R_0 \left(\frac{\rho_0}{\rho_{0\alpha}} \right) \left(\frac{T(V)}{T_0} \right)^\alpha \left(\frac{V}{V_0} \right)^{n/3} \left(\frac{v_0 - V}{v_0 - V_0} \right)^{-2n} \left(\frac{V_{0\alpha}}{V} \right). \quad (10)$$

Итак, в интервале времен $t_{\max} < t < t_{\text{ex}}$ модельное соотношение (10) для объемно-температурной зависимости электросопротивления образца $R = R(t)$ вдоль фазовой траектории ступенчатого ударного сжатия может быть представлено полуэмпирической функцией объема, содержащее один заранее заданный параметр $\rho_0 = 51.0 \mu\text{Ом} \cdot \text{см}$ и два подгоночных параметра: α , и n . Параметры α , и n находятся методом наименьших квадратов исходя из требования наилучшего совпадения модельного профиля (10) и экспериментального

профиля $R = R(t)$. На рис. 3б показано удовлетворительное согласие экспериментального 1 и модельного 3 профилей электросопротивления образца при разгрузке в интервале времен $t_{\max} < t < t_{\text{ex}}$. При этом значения определяющих параметров α , n и коэффициента детерминации R^2 оказались следующими: $\alpha = 0.77(1)$, $n = 3.25(10)$ и $R^2 = 0.977$.

Таким образом, разработанные уравнения состояния ϵ -Fe железа вместе с определяющим соотношением для объемно-температурной зависимости электросопротивления позволяют моделировать электрофизический ударно-волновой эксперимент и определять “температурный” α и “объемный” n параметры, характеризующие объемно-температурную зависимость $\rho = \rho(T, V)$ удельного электросопротивления ϵ -Fe железа при его ступенчатом ударном нагружении в диапазоне давлений ~ 20 –70 ГПа и температур ~ 750 –950 К. Соответственно определяющее соотношение (9) с найденными коэффициентами представляет собой экспериментально-расчетные данные об электрофизических свойствах ϵ -Fe железа в условиях ступенчатого ударно-волнового нагружения.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Отметим, что использование значений $\rho_0 = 51.0 \mu\text{Ом} \cdot \text{см}$, $\alpha = 0.77(1)$, $n = 3.25(10)$ для ϵ -Fe железа, найденных по экспериментальным данным в области разгрузки, дают приемлемые результаты и в области сжатия ϵ -Fe железа. Действительно, экспериментальный 1 и модельный 3 профили на рис. 3б, согласуются между собой не только в интервале времен $t_{\max} < t < t_{\text{ex}}$, когда давление уменьшается, но и в области $t_{0\epsilon} < t < t_{\max}$, ко-

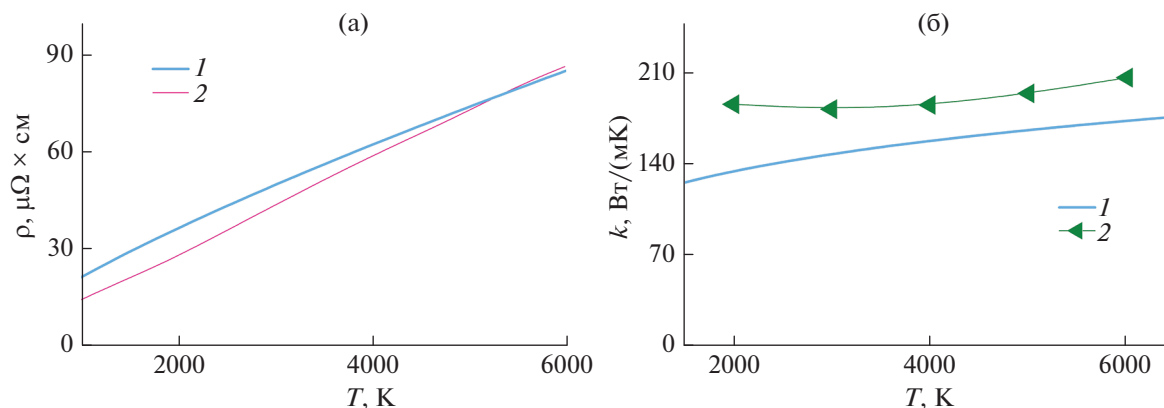


Рис. 10. Экстраполяция зависимостей электросопротивления ρ (а) и теплопроводности k (б) от температуры T в область давлений 300 ГПа. (а): 1 – изохора (9), 2 – расчетная температурная зависимость удельного электросопротивления ϵ -Fe железа с учетом эффекта насыщения [Xu et al., 2018]; (б): 1 – изохора (11), 2 – расчетная температурная зависимость коэффициента теплопроводности ϵ -Fe железа с учетом эффекта насыщения [Xu et al., 2018].

гда давление возрастает от значения $P_{0\epsilon}$ до P_{\max} . Это свидетельствует в пользу того, что модельное соотношение (9) с найденными параметрами α и n для объемно температурной зависимости удельной электропроводности ϵ -Fe железа адекватно экспериментальным ударно-волновым данным в исследованной области давлений ~ 20 – 70 ГПа и температур ~ 750 – 950 К как при сжатии, так и при разгрузке.

Сопоставим электрофизические свойства ϵ -Fe железа в условиях ударного сжатия и в условиях высоких статических давлений. Для этого воспользуемся разработанным выше уравнением состояния и рассчитаем изотермы и изобары объемно-температурной зависимости (9) для ϵ -Fe железа.

На рис. 7а цифрой 1 обозначена изотерма (9) при температуре 300 К в координатах давление–удельное электросопротивление до 80 ГПа. На рис. 7а приведена также модельная комнатная изотерма 2 из работы [Seagle et al., 2013] для экспериментальных точек 3. Как видно, график 1 располагается существенно выше графика 2. Формальная причина этого различия заключается главным образом в следующем. Несмотря на то, что смысл основных параметров ρ_0 , a , n модельных соотношений для $\rho = \rho(T, V)$ в работе [Seagle et al., 2013] и в формуле (9) одинаков, процедуры нахождения этих параметров для (9) и в работе [Seagle et al., 2013] различны. В работе [Seagle et al., 2013] заранее полагалось $a = \text{const} = 1$, а подгоночными были ρ_0 и n . Как отмечалось выше, в нашей работе постоянным считался параметр $\rho_0 = \text{const} = 51.0 \mu\text{Ом} \cdot \text{см}$, а подгоночными были a и n . Мы предпочли свой вариант в связи с тем, что значение $\rho_0 = 51.0 \mu\text{Ом} \cdot \text{см}$ имеет экспериментальное обоснование для ϵ -Fe железа при нулевом давлении (см. [Gomi et al., 2013]).

На рис. 7а также представлены гидростатические экспериментальные комнатные изотермы 4 [Zhang et al., 2020] и 5 [Gomi et al., 2013]. Как видно в диапазоне давлений 20–80 ГПа наша комнатная изотерма 1, превышает литературные данные 3, 4, 5 на 10 – $20 \mu\text{Ом} \cdot \text{см}$. Очевидно, это различие может быть частично истолковано на основе общепринятых представлений. Действительно, как хорошо известно, ударные волны генерируют значительную плотность дефектов кристаллической решетки, что приводит к увеличению удельного электросопротивления ударно-сжатого поликристалла.

Обсудим соотношение полученных результатов с литературными данными при высоких давлениях и температурах ударно-волнового и гидростатического сжатия вдоль изобар высокого давления. На рис. 7б графиком 1 показана расчетная изобара соотношения (9) для ϵ -Fe железа при давлении 105 ГПа в диапазоне температур 250–3000 К. Ее сопоставление с ударно-волновыми данными из работы [Keeler, Mitchel, 1969] затруднительно, поскольку в этой работе не указаны значения температур и объемов. В отличие от этого в работе [Vi et al., 2002] для двух состояний (101 ГПа; 2010 К) и (208 ГПа; 5220 К) ударно-сжатого ϵ -Fe железа приведены значения удельного электросопротивления $68.9 \mu\text{Ом} \cdot \text{см}$ и $130.7 \mu\text{Ом} \cdot \text{см}$ соответственно. Первая точка [Vi et al., 2002] обозначена на рис. 7б цифрой 2. Как видно, результаты 1 и 2 практически совпадают. Вторая точка отличается от расчетов по (9) на 20%. Таким образом, в целом согласие наших результатов и результатов [Vi et al., 2002] можно считать удовлетворительным. Отметим для дальнейшего, что результаты 1 и 2 на рис. 7б, совпадая между собой, совпадают и с изобарой 3 разогретого сплава железа с кремнием Fe4.3%Si.

На рис. 7б представлены статические экспериментальные изобары ϵ -Fe железа 4 [Ohta et al., 2016] и 5 [Zhang et al., 2020]. Как и для изотерм, наша изобара 1 располагается существенно выше экспериментальных изобар ϵ -Fe железа — здесь различия достигают $30 \mu\text{Ом} \cdot \text{см}$. Это расхождение между полученными и литературными гидростатическими данными можно было бы отнести на счет незамеченных паразитных эффектов используемой ударно-волновой методики. Вместе с тем представляется, что список возможных методических ошибок, (шунтирование, теплопроводность, скин-эффект, реакция железа с разогретым изолятором) исчерпан выше и не поддерживает это объяснение. Поэтому не исключено, что взаиморасположение всех изотерм рис. 7а и изобар на рис. 7б обусловлено тем, что ударно-сжатое ϵ -Fe железа оказывается в некоем состоянии, в котором его электрофизические свойства отличаются от статически сжатого чистого ϵ -Fe железа и приближаются к электрофизическим свойствам сжатого и разогретого сплава железа с кремнием Fe4.3%Si. Однако очевидно, что это объяснение всего лишь рабочая гипотеза, требующая дополнительной аргументации и проверки.

Оценим теперь объемно-температурную зависимость коэффициента теплопроводности ударно-сжатого ϵ -Fe железа. Воспользуемся снова соотношением (9) в паре с разработанным выше уравнением состояния и сопоставим расчетные значения теплофизических свойства ударно-сжатого ϵ -Fe железа с литературными данными при высоких статических давлениях.

Для этого рассчитаем барическую зависимость теплопроводности $k = k(V, T)$ ϵ -Fe железа вдоль комнатной изотермы, воспользовавшись законом Видемана—Франца:

$$k = L \frac{T}{\rho(V, T)}, \quad (11)$$

где $L = 2.45 \times 10^{-8} \text{ ВтОм}$; K^2 — постоянная Лоренца; $\rho(V, T)$ — объемно-температурная зависимость удельного электросопротивления (9) ϵ -Fe железа с определенными выше коэффициентами ρ_0 , α и n . На рис. 8 цифрой 1 обозначен график (11), полученный при температуре $T = \text{const} = 300 \text{ К}$. На этом же рисунке ромбами 2 приведены экспериментальные значения коэффициента теплопроводности поликристаллического ϵ -Fe железа, скопированные с рис. 10 работы [Ohta et al., 2018]. Как видно, график 1 удовлетворительно согласуется со статическим экспериментом, проходя через среднюю точку 3 данных [Ohta et al., 2018].

Рассмотрим теперь изобару коэффициента теплопроводности при высоком давлении. На рис. 9 представлена изобара 1, в виде графика (11) при давлении 53 ГПа на фоне экспериментальных точек, полученных при статическом сжатии в рабо-

те [Hasegawa et al., 2019] в диапазоне температур 1200–1500 К при этом же давлении. Здесь также наши ударно-волновые данные 1 непротиворечиво соотносятся с экспериментальными точками [Hasegawa et al., 2019], практически пересекая их среднюю точку 3.

Таким образом, модельные расчеты коэффициента теплопроводности ϵ -Fe железа в высокодефектном ударно-сжатом состоянии, проведенные с использованием закона Видемана—Франца и теоретического значения числа Лоренца удовлетворительно согласуются со статическим экспериментом.

Наконец, рассмотрим алгебраические вычисления по формулам (9) и (11) для ϵ -Fe железа при постоянном значении объема в области экстраполяции к более высоким давлениям. Например, зафиксируем удельный объем в этих формулах величиной $V = \text{const} = V_i = 4.282 \text{ см}^3/\text{моль}$ и построим изохоры (9) и (11) в диапазоне температур $T = 1000\text{--}6000 \text{ К}$. Согласно построенному выше уравнению состояния ϵ -Fe железа диапазон давлений $P_i = P(V_i, T)$ составит интервал 256–297 ГПа, в который попадает давление на границе внутреннего ядра Земли. Полученные графики $\rho = \rho(T, V_i)$ и $k = k(T, V_i)$ обозначены цифрой 1 на рис. 10а и 10б соответственно.

На этих же рис. 10а и 10б представлены результаты фундаментальных расчетов [Xu et al., 2018] температурной зависимости $\rho = \rho(T, V_i)$ и $k = k(T, V_i)$ с использованием метода теории функционала плотности 2. Как видно графики 1 и 2 разумно согласуются между собой качественно и количественно. Наилучшее совпадение 1 и 2 наблюдается в диапазоне температур 4000–6000, где отличия не превышают 5% для $\rho = \rho(T, V_i)$ и 20% для $k = k(T, V_i)$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Измерено электросопротивление образцов железа с гексагональной плотноупакованной решеткой (ϵ -Fe) в условиях специфического режима нагружения, состоящего из ступенчато-циклической фазы сжатия и последующей фазы плавного уменьшения давления. Измерения выполнены в области фазовой диаграммы железа при давлениях $\approx 20\text{--}70 \text{ ГПа}$ и температурах $\approx 750\text{--}950 \text{ К}$.

Рассмотрена величина осложняющих эффектов при измерении электросопротивления ударно-сжимаемых железных образцов, обусловленных проводимостью изоляционной среды, скин-эффектом, а также разогревом образца окружающим горячим изолятором.

Разработаны уравнения состояния ϵ -Fe железа, которые вместе с определяющим соотношением

для объемно-температурной зависимости электросопротивления позволяют моделировать электрофизический ударно-волновой эксперимент, переходить от электросопротивления образцов к удельным величинам и определять параметры, характеризующие объемно-температурную зависимость удельного электросопротивления ϵ -Fe железа при его ступенчатом ударном нагружении и последующей разгрузке.

Сопоставлены объемно-температурные зависимости удельного электросопротивления ϵ -Fe железа в условиях высоких статических и динамических давлений. Показано, что в диапазоне давлений 20–70 ГПа ударно-волновые электрофизические данные превышают экспериментальные литратурные статические данные на 10–30 $\mu\text{Ом} \cdot \text{см}$.

Установлено различие электрофизических свойств ϵ -Fe железа при статическом и ударном сжатии и подобие электрофизических свойств ударно-сжатого ϵ -Fe железа с электрофизическими свойствами статически сжатого и разогретого кремнистого железа.

Выполнены расчеты объемно-температурной зависимости коэффициента теплопроводности ϵ -Fe с использованием закона Видемана–Франца для описания теплофизических свойств ϵ -Fe при высоких динамических давлениях и проведено сравнение расчетных значений теплофизических свойства ударно-сжатого ϵ -Fe железа с литературными данными при высоких статических давлениях. Показано, что в диапазоне давлений 20–50 ГПа барическая зависимость коэффициента теплопроводности вдоль комнатной изотермы удовлетворительно согласуется со статическим экспериментом. Показано также, что расчетные значения коэффициента теплопроводности в диапазоне температур 1200–1500 К непротиворечиво соотносятся с экспериментальными точками вдоль изобары 53 ГПа.

Экстраполяция найденных объемно-температурных зависимостей электросопротивления и теплопроводности ϵ -Fe железа в область давлений 300 ГПа разумно согласуется с литературными теоретическими результатами по электро- и теплопроводности железа.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Ададуров Г.А. Экспериментальное исследование химических процессов в условиях динамического сжатия // Успехи химии. 1986. Т. 55. Вып. 4. С. 555–578.

Гольшев А.А., Молодец А.М. Электросопротивление полимерной изоляции в мегабарном диапазоне давлений ударного сжатия // Физика горения и взрыва. 2013. Т. 49. № 2. С. 106–112.

Ким В.В., Молодец А.М. Программа для расчета волновых взаимодействий и термодинамического состояния многослойных мишеней при одномерном ударном нагружении СТАГ. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016616914. 22.06.2016 г.

Молодец А.М., Шахрай Д.В., Савиных А.С., Гольшев А.А., Ким В.В. Уравнения состояния политетрафторэтилена для расчета его ударного сжатия в мегабарном диапазоне давлений // Физика горения и взрыва. 2013. Т. 49. № 6. С. 121–129.

Молодец А.М. Температурная зависимость откольной прочности и уравнение состояния аустенитной хромоникелевой стали 18–10 // Физика твердого тела. 2015. Т. 57. Вып. 10. С. 1992–1997.

Молодец А.М. Уравнения состояния мусковита при высоких давлениях и температурах // Физика Земли. 2022. № 1. С. 130–139.

Молодец А.М., Шахрай Д.В., Гольшев А.А. Полуэмпирическое описание теплофизических свойств дейтерида лития при высоких давлениях и температурах // Теплофизика высоких температур. 2017. Т. 55. № 4. С. 523–527.

Молодец А.М., Гольшев А.А. Объемно-температурная зависимость электро- и теплофизических свойств α -железа при высоких давлениях и температурах // Журн. технической физики. 2021. Т. 91. Вып. 9. С. 1403–408.

Молодец А.М., Гольшев А.А., Емельянов А.Н., Козлов А.А. Магнитные превращения и полиморфный переход // Журн. технической физики. 2021. Т. 91. Вып. 5. С. 803–807.

Bi Y., Tan H., Jing F. Electrical Conductivity of Iron under Shock Compression up to 200 GPa // J. Phys.: Condensed Matter. 2002. V. 14(44). P. 10849–10854.

Brown J.M., Fritz J.N., Hixson R.S. Hugoniot data for iron // J. Applied Physics. 2000. V. 88. № 9. P. 5496–5498.

Dewaele A., Loubeyre P., Occelli F., Mezouar M., Dorogokupets P. I., Torrent M. Quasihydrostatic Equation of State of Iron above 2 Mbar // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 97. P. 215504.

Gomi H., Ohta K., Hirose K., Labrosse S., Caracas R., Verstraete M.J., Hernlund J.W. The high conductivity of iron and thermal evolution of the Earth's core // Physics of the Earth and Planetary Interiors. 2013. V. 224. P. 88–103.

Grant S.C., Ao T., Seagle C.T., Porwitzky A.J., Davis J.-P., Cochrane K.R., Dolan D.H., Lin J.-F., Ditmire T., Bernstein A.C. Equation of state measurements on iron near the melting curve at planetary core conditions by shock and ramp compressions // J. Geophysical Research: Solid Earth. 2021. V. 126. № 3. P. e2020JB020008.

Hasegawa A., Yagi T., Ohta K. Combination of pulsed light heating thermoreflectance and laserheated diamond anvil cell for in-situ high pressure-temperature thermal diffusivity measurements // Rev. Sci. Instrum. 2019. V. 90. P. 074901(1-8).

- Johnson P.C., Stein B.A., Davis R.S. Temperature dependence of the shock induced transformation in iron // J. Appl. Phys. 1962. V. 33. P. 557–560.
- Keeler R.N., Mitchel A.C. Electrical conductivity, demagnetization, and the high-pressure phase transition in shock-compressed Iron // Solid State Communications. 1969. V. 7. P. 271–274.
- Kerley G.I. Multiphase equation of state for iron. Tech. Rep. SAND93-0027. Sandia 613 National Laboratories. Albuquerque. NM. 1993.
- Mao H.-K., Wu Y., Chen L.C., Shu J.F., Jephcoat A.P. Static Compression of Iron to 300 GPa and Fe_{0.8}Ni_{0.2} Alloy to 260 GPa: Implications for Compression of the Core // J. Geophysical Research. 1990. V. 95. № B13. P. 21.737–21.742.
- Ohta K., Nishihara Y., Sato Y., Hirose K., Takashi Yagi T., Saori I. Kawaguchi S.I., Hirao N., Ohishi Y. An Experimental Examination of Thermal Conductivity Anisotropy in hcp Iron // Frontiers in Earth Science. 2018. V. 6. Article 176.
- Seagle C.T., Cottrell E., Fei Y., Hummer D.R., Prakapenka V.B. Electrical and thermal transport properties of iron and iron-silicon alloy at high pressure // Geophys. Res. Lett. 2013. V. 40. P. 5377–5381.
- Vocadlo L. Mineralogy of the Earth – The Earth’s core: Iron and iron alloys. Treatise on Geophysics. Mineral Physics / G.D. Price (ed.). Oxford: Elsevier. 2007. V. 2. P. 91–120.
- Xu J., Zhang P., Haule K., Minar J., Wimmer S., Ebert H., Cohen R.E. Thermal Conductivity and Electrical Resistivity of Solid Iron at Earth’s Core Conditions from First Principles // Physical Review Letters. 2018. V. 121. P. 096601(1-6).
- Zhang Y., Hou M., Liu G., Zhang Ch., Prakapenka V.B., Greenberg E., Fei Y., Cohen R.E., Lin J.F. Reconciliation of Experiments and Theory on Transport Properties of Iron and the Geodynamo // Physical Review Letters. 2020. V. 125. P. 078501(1-7).
- Жарков В.Н. Физика земных недр. М.: ООО “Наука и образование”. 2012. 384 с.
- Hirose K., Wood B., Vočadlo L. Light elements in the Earth’s core // Nature Reviews. Earth & Environment. 2021. V. 2. P. 645–657.
- Zhang Y., Luo K., Hou M., Driscoll P., Salke N.P., Minar J., Prakapenka V. B., Greenberg E., Hemley R.J., Cohen R.E., Lin J.F. Thermal conductivity of Fe-Si alloys and thermal stratification in Earth’s core // PNAS. 2022. V. 119. No. 1 P. 2119001119.
- Ohta K., Kuwayama Y., Hirose K., Shimizu K., Ohishi Y. Experimental determination of the electrical resistivity of iron at Earth’s core conditions // Nature. 2016. V. 534. P. 95–98.
- Yang F., Hu X., and Fei Y. In situ measurements of electrical resistivity of metals in a cubic multi-anvil apparatus by van der Pauw method // Rev. Sci. Instrum. 2022. V.93. P. 053902(1-7).
- Набатов С.С., Дрёмин А.Н., Постнов В.И., Якушев В.В. Измерением электропроводности серы при сверхвысоких динамических давлениях // Письма в ЖЭТФ. 1979. Т. 29. вып. 7. С. 407–410.
- Basu A., Field M.R., McCulloch D.G., Boehler R. New measurement of melting and thermal conductivity of iron close to outer core conditions // Geoscience Frontiers. 2020. V. 11. P. 565–568.

ε-Fe Electrical Resistivity at High Pressures of Stepwise Shock Compression

A. M. Molodets^{a,*} and A. A. Golyshev^a

^aInstitute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, 142432 Russia

*e-mail: molodets@icp.ac.ru

In situ electrical resistivity measurements are performed on samples of iron with a hexagonal close-packed lattice (ε-Fe), compressed and heated by stepwise shock loading. Equations of state for ε-Fe are constructed. The obtained experimental results are mathematically simulated in the hydrocode based on the developed equations of state. The modeling results are used to reconstruct the volumetric–temperature dependence of the ε-Fe electrical resistivity at pressures of ≈20–70 GPa and temperatures of ≈750–950 K. The volume–temperature dependence of the ε-Fe thermal conductivity coefficient is calculated according to the Wiedemann–Franz law. The results obtained for the electrical and thermal conductivity of shock compressed and heated ε-Fe are compared with literature experimental and theoretical data for iron and silicon iron.

Keywords: iron, electrical conductivity, thermal conductivity, high pressures, equations of state, phase diagram, shock waves