УДК 536.715

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ГЕРМАНИЯ

© 2022 г. К. К. Маевский^{1, 2, *}

¹Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск, Россия ²Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

> **E-mail: konstantinm@hydro.nsc.ru* Поступила в редакцию 14.02.2022 г. После доработки 13.07.2022 г. Принята к публикации 13.10.2022 г.

С помощью модифицированного уравнения состояния выполнено численное моделирование термодинамических параметров ударно-волнового нагружения германия в чистом виде, а также сплавов с германием в качестве компонента по термодинамически равновесной модели. Определены параметры уравнений состояния для двух фаз германия. Произведено моделирование термодинамических параметров для этих фаз Ge I и Ge II в диапазоне значений давления от 1 до 400 ГПа. Построены ударные адиабаты обеих фаз, рассчитаны значения теплоемкости вдоль нормальных изобары и изохоры, а также значения энтропии для германия в зависимости от температуры. Проведено сравнение результатов моделирования с результатами других авторов (как расчетов, так и экспериментов).

DOI: 10.31857/S0040364422050210

введение

Исследования высокоэнергетического воздействия на элементы группы IVa Периодической таблицы Менделеева проводятся для решения многих задач современной науки и производства с учетом внутренних свойств данных элементов, в частности, фазовых переходов при высокоэнергетических нагрузках в элементах данной группы: углероде, кремнии и германии [1]. Большое внимание уделяется германию Ge [2–5]. Германий, являясь полупроводниковым материалом, лег в основу развития транзисторной технологии ввиду того, что имеет много преимуществ перед кремнием [6]. Как отмечается в [7], хотя кремний в области интегральных схем находится на переднем плане, растет интерес к германию в связи с большими возможностями в области субмикронных технологий. При сжатии германия наблюдается фазовый переход, при котором алмазоподобная структура (Ge I) переходит в тетрагональную структуру (Ge II) [8], и, хотя были предложены различные теоретические методы расчета уравнения состояния германия, например [9-11], исследования в этом направлении продолжаются. При увеличении давления германий переходит в более плотные модификации. Новые кристаллические формы германия наблюдались при различных термодинамических условиях [12].

Существует большое число подходов к выбору уравнения состояния твердого тела при динамических нагрузках, при этом построение адекватных уравнений состояния вещества само по себе является большой научной задачей [13]. С учетом фазовых переходов, область которых может быть рассмотрена как смесь фазы низкого и фазы высокого давления по аналогии с [14], а также с интересом к гетерогенным материалам с германием в качестве компонента, для германия желательно использовать достаточно простую модель уравнения состояния. Сложность и разнообразие исследуемых материалов делает задачу создания простых уравнений состояния с малым числом параметров по-прежнему актуальной [15–21].

Как отмечалось в [22], переходное давление германия зависит от того, насколько близко приложенное давление к гидростатическому, и от наличия слвигающих составляющих напряжения. Фазовое превращение германия I–II определено при давлении около 9 ГПа с уменьшением объема на 19%. Этот переход исследован при касательных напряжениях и высоких давлениях [23–30]. Существенное изменение объема в области фазового перехода компонентов, входящих в состав исследуемых материалов, позволяет расширить диапазон изменения термодинамических параметров гетерогенных материалов с такими компонентами при высокоэнергетических нагрузках. Это вызывает появление новых моделей для описания термодинамических параметров смесей, сплавов и композитов (см., например, [31-33]). Проводятся исследования сплавов, содержащих германий [34], и материалов, включающих соединения с германием [35].

Наличие большого количества исследований германия и экспериментальных данных [36, 37] позволяет провести сравнение результатов моделирования с ними. Дополнительно для верификации модели оказываются полезными результаты, полученные на основании экспериментов по ударно-волновому воздействию на гетерогенные материалы, например сплавы, где германий присутствует в качестве компонента. Термодинамически равновесная модель ТРМ [38, 39] дает возможность описывать данные, полученные на основании эксперимента, в широком диапазоне значений давления и пористости как для чистых веществ, так и для гетерогенных материалов. При этом данная модель позволяет достоверно моделировать параметры смесей и сплавов с компонентами. которые испытывают фазовый переход при ударноволновом нагружении [40, 41]. Вопрос согласованности уравнения состояния был решен в модифицированной модели ТРМ2 [42, 43].

Целью данного исследования является построение уравнений состояния германия для двух фаз (Ge I и Ge II), позволяющих достоверно рассчитывать термодинамические параметры, такие как давление, коэффициент сжатия, массовая и волновая скорости при моделировании ударно-волнового нагружения.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Для моделирования термодинамических параметров при ударно-волновом нагружении германия используется уравнение состояния модели ТРМ2. Данная модель является развитием модели ТРМ, которая разработана для расчета гетерогенных материалов [42, 43]. При расчетах используется предположение о том, что все компоненты исследуемого материала при высокоэнергетическом воздействии находятся в термодинамическом равновесии. Уравнения для конденсированного компонента выписываются как суммы потенциальных и тепловых компонентов давления P_C , P_T , и удельной энергии E_C , E_T :

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

$$P_T(\sigma, \tau) = c_{V0} \rho_0 T_0(\tau - 1) \sigma k \frac{1 + a_1 \tau}{1 + a_2 \tau},$$
 (2)

$$E_{C}(\sigma) = \frac{c_{0}^{2}}{n} \Big(\frac{1}{n-1} (\sigma^{n-1} - 1) - 1 + \frac{1}{\sigma} \Big),$$

$$E_{T}(\sigma, \tau) = F(\tau) -$$

$$-c_{V0}T_0k\frac{1+2a_2\tau + (a_1 - a_2 + a_1a_2)\tau^2}{(1+a_2\tau)^2}\ln(\sigma),$$

$$F(\tau) = c_{V0}T_0\left[(\tau - 1)\left(\lambda - \frac{b_1}{b_2}\right) - \frac{1}{2}\right]$$
(3)

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

Здесь р, 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; $c_{\nu 0}$, c_0 — соответственно значение теплоемкости и скорости звука в нормальных условиях. С учетом области применения модели для областей давления больше 1 ГПа начальная энергия E_0 при нормальных условиях не принимается в расчет. Значения теплоемкости вдоль изохоры c_V и изобары c_p рассчитываются по следующим уравнениям:

$$c_{V}(\sigma,\tau) = c_{V0} \left[\lambda - \frac{1+b_{1}\tau}{1+b_{2}\tau} \right] -$$

$$- c_{V0}k \frac{2\tau \left(a_{1}-a_{2}+a_{1}a_{2}-a_{2}^{2}\right)}{\left(1+a_{2}\tau\right)^{3}} \ln(\sigma),$$

$$c_{P}(\sigma,\tau) = c_{V}(\sigma,\tau) - T_{0}\tau \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{V}^{2} / \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{T}.$$
(5)

Параметры определяются по соответствию экспериментальным данным. Функции энтропии, энтальпии и термодинамического потенциала Гиббса получены в следующем виде:

$$S(\sigma, \tau) = c_{V} \left[S_{1}(\sigma, \tau) + S_{2}(\sigma, \tau) \right] + S_{3},$$

$$S_{1}(\sigma, \tau) = (\lambda - 1) \ln(\tau) + \left(1 - \frac{b_{1}}{b_{2}} \right) \ln(1 + b_{2}\tau) + \frac{a_{1} - a_{2} + a_{1}a_{2} - a_{2}^{2}}{a_{2}(1 + a_{2}\tau)^{2}} \ln(\sigma),$$

$$S_{2}(\sigma, \tau) = k \frac{a_{1} - 1 - a_{2} - 2a_{1}\tau - a_{1}a_{2}\tau^{2}}{(1 + a_{2}\tau)^{2}} \ln(\sigma),$$

$$H(\sigma, \tau) = E(\sigma, \tau) + \frac{P(\sigma, \tau)}{\sigma\rho_{0}},$$

$$G(\sigma, \tau) = E(\sigma, \tau) + \frac{P(\sigma, \tau)}{\sigma\rho_{0}} - T_{0}\tau S(\sigma, \tau).$$
(6)

Для построения ударных адиабат гетерогенных материалов выписываются условия сохранения потока массы для каждого компонента смеси и условия сохранения потоков импульса и энергии для смеси в целом на фронте ударной волны. При этом газ в порах рассматривается как один из компонентов. Данный подход позволяет моделировать как гетерогенные материалы, так и чистые вещества. В последнем случае расчет проводится для смеси с одним конденсированным компонентом [42]. В итоге получается следующее выражение для исследуемого материала, в состав которого входят *z* конденсированных компонентов, с начальными объемными долями μ_{k0} :

Параметры уравнения состояния для германия

Параметр	Ge I	Ge II
ρ ₀ , г/см ³	5.323	6.572
<i>с</i> _{<i>V</i>0} , Дж/(кг К)	310.3	310.3
<i>c</i> ₀ , м/с	3733	3597
n	4.3	4.1
S_3	-3914	-3513
a_1	2.506×10^{-3}	1.049×10^{-3}
<i>a</i> ₂	3.754×10^{-3}	2.417×10^{-3}
k	0.751	1.152
b_1	-69.424	-69.424
b_2	18.845	18.845
λ	-2.436	-2.436

$$P = \frac{\sum_{i=1}^{z} A_{i} \frac{\mu_{i0}}{\sigma_{i}} \left[\left(h_{i} - \frac{n_{i}+1}{n_{i}-1} \right) \sigma_{i}^{z_{i}} + \frac{2n_{i}\sigma_{i}}{n_{i}-1} - h_{i} - 1 \right]}{\sum_{i=1}^{z} \frac{\mu_{i0}}{\sigma_{i}} h_{i} + \left(\frac{h_{g}}{\sigma_{g}} \right) \left(1 - \sum_{i=1}^{z} \mu_{i0} \right) - 1}{h_{i} = \frac{2}{\Gamma_{i}} + 1, \quad h_{g} = \frac{2}{\gamma - 1} + 1.}$$

Здесь $\sigma_i = \rho_i / \rho_{i0}$, $\sigma_g = \rho_g / \rho_{g0}$ – значения коэффициента сжатия соответствующего компонента; $A_i = \rho_{0i}c_{0i}/n_i$, n_i – производная изотермического модуля упругости; ρ_g , ρ_{g0} – текущая и начальная плотности газа; $\gamma = 1.41$ – показатель адиабаты. Для газа используется уравнение состояния идеального газа. Значение теплоемкости для газа – 718 Дж/(кг K), плотность $\rho_{g0} = 1.293 \times 10^{-3}$ г/см³, что соответствует воздуху [44]. Функция $\Gamma = P_T V/E_T$ определяет вклад тепловых компонентов давления (2) и удельной энергии (3) [38]. С учетом условия равенства температур компонентов можно построить соответствующие ударные адиабаты.

Параметры, которые определены для двух фаз германия, приведены в таблице.

Указанные параметры позволяют описывать данные, полученные на основании экспериментов по ударно-волновому нагружению для германия, в переделах точности эксперимента. Методика определения параметров конденсированных компонентов описана в [42]. Параметры k, a_1, a_2 определяются по зависимости Г, которая является аналогом коэффициента Грюнайзена. Значения λ, b_1, b_2 получены на основании экспериментальных данных по $c_V(T)$. Значение энтропии фазы германия Ge I при нормальных условиях — 31.09, для Ge II — 60.18 Дж/(моль K); значения изотермического модуля упругости — 74.18 и 85.03 ГПа соответственно; T_0 в расчетах принималась равной 300 К.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для верификации модели проведено сравнение результатов моделирования с имеющимися данными для двух фаз германия. Изотерма для германия Ge I при T = 300 K, полученная по (1), (2), экспериментальные данные [45] и результаты модельных расчетов [9, 46–48] показаны на рис 1. Для сравнения полученных результатов с ранее проведенными исследованиями используются модельные расчеты, которые добавлены на рис. 2 из работы [9], где для Ge I применялись следующие значения изотермического модуля упругости: $B_0 = 74.9$ ГПа [45, 49] и $B'_0 = 4.35$ [49]. В расчетах по (1), (2) $B_0 = 74.18$ ГПа и $n = B'_0 = 4.3$.

Для проверки достоверности описания вклада тепловых составляющих в рассматриваемом урав-



Рис. 1. Давление в зависимости от степени сжатия германия Ge I при T = 300 K; экспериментальные данные [45]: 1 -методом негерметичной ячейки, 2 -методом герметичной ячейки; расчеты: 3 -расчет [9], 4 -уравнения [46, 47], 5 -уравнение состояния [48], 6 -уравнения (1), (2).

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР том 60 № 6 2022



Рис. 2. Зависимости теплоемкости германия от температуры: сплошная линия – модельный расчет (4); данные: 1 - [49], 2 - [50], 3 - [51], 4 - [52].

нении состояния рассчитаны значения изобарной теплоемкости германия при нормальном давлении и температурах в диапазоне от 100 до 2000 К. Результаты моделирования изобарной теплоемкости с_Р для германия в зависимости от температуры показаны на рис. 2. Для сравнения приведены данные экспериментов [49, 50] и расчетов по моделям других авторов [51, 52]. Результаты модельного расчета изохорной теплоемкости германия c_V представлены на рис. 3. На нем же показаны результаты расчетов и экспериментальные значения изохорной теплоемкости, полученные в [53] с учетом приведенных в [49] экспериментальных значений изобарной теплоемкости, температурного коэффициента объемного расширения и изотермической сжимаемости.

Расчетные зависимости энтропии для германия в сравнении с данными из [8, 51] показаны на рис. 4 до температуры 3500 К. Достигнуто хорошее соответствие расчетных кривых рассматриваемой модели с имеющимися данными.

Результаты моделирования ударно-волнового нагружения для германия плотностью $\rho_0 =$ = 5.328 г/см³ и данные, полученные на основании экспериментов из [2, 36, 54], приведены на рис. 5 в переменных давление—массовая скорость, на рис. 6 в переменных давление—степень сжатия. Начало фазового перехода германия при расчетах по авторской модели предполагается также при давлении 9 ГПа, аналогично [22]. Значение плотности фазы высокого давления Ge II определено, исходя из уменьшения объема на 19% [22] $\rho_0 = 6.572$ г/см³. Излом кривой при 30 ГПа определяется как окончание фазового перехода, т.е. полный переход фазы германия Ge I в фазу Ge II. По-



Рис. 3. Зависимости изохорной теплоемкости германия от температуры: результаты моделирования: 1 – результаты расчетов [53], 2 – расчет в рамках модели Дебая [53], 3 – модельный расчет (5); точки – результаты расчетов [53].

лучено достоверное описание имеющихся данных, полученных на основании экспериментов.

Результаты моделирования показывают, что авторская модель позволяет достоверно описывать данные экспериментов для германия. При более интенсивных нагрузках образцов экспериментальные точки приближаются к ударной адиабате германия Ge II для той же начальной плотности, что у образцов Ge I. Это может свидетельствовать о полном переходе германия в фазу высокого давления, которая в данном случае соответствует Ge II.

Учитывая необходимость моделирования различных по составам гетерогенных материалов с германием в качестве компонента, представляет интерес сравнить результаты расчетов по моделям ТРМ и ТРМ2. Как отмечалось в [42], модель ТРМ хорошо описывает динамические параметры удар-



Рис. 4. Зависимости энтропии германия от температуры: сплошная линия – расчет для Ge I, штриховая – Ge II; экспериментальные данные: *1* – [8], *2* – [51].

Р. ГПа

300

200

100

1.0



Рис. 5. Ударные адиабаты германия, давление в зависимости от массовой скорости: 1 - результаты расчета для Ge I, 2 -Ge II; эксперимент: 3 - [2], 4 - [54], 5 - [36].

но-волнового нагружения, такие как давление, коэффициент сжатия, волновые и массовые скорости, однако завышает до 10% значения температуры при высоких давлениях. Этот факт связан с тем, что используется постоянное значение теплоемкости, по аналогии с [55]. При этом для определения параметров модели ТРМ2 требуются экспериментальные данные зависимости теплоемкости от температуры. Ввиду того, что в состав гетерогенного материала могут входить компоненты, по которым отсутствуют или недостаточно таких данных, более простая модель ТРМ может быть полезна на начальной стадии исследования новых материалов.

Сравнительные расчеты по двум моделям для германия показаны на рис. 7. На основании этих расчетов можно сделать вывод, что до значения волновой скорости 7 км/с, соответствующего давлению 100 ГПа, результаты расчетов по обеим моделям близки. Небольшое расхождение наблюдается при более высоких значениях динамических нагрузок. Дополнительной линией показано значение волновой скорости 4.3 км/с, которое соответствует давлению фазы Ge I 9 ГПа. При данной волновой скорости значения термодинамических потенциалов Гиббса (6) Ge I и Ge II равны. Этот результат можно рассматривать как область начала фазового перехода при высокоэнергетическом воздействии.

Параметры, которые дали возможность достоверно описать высокоэнергетическое нагружение германия, позволили описать ударно-волновое нагружение сплавов золота Au и Ge. Для моделирования необходимо знать лишь состав и плотность сплава для описания динамического нагружения. Результаты расчетов по модели ТРМ для трех сплавов Au с Ge, имеющих следующие значения плотности и массовых долей –



@ O

1.5

нию волновой скорости. Результаты расчетов хорошо соответствуют данным экспериментов. Предполагается, что фазовый переход германия в сплаве начинается при тех же условиях, что в чистом германии. Данное предположение получило свое подтверждение при расчетах смесей с двумя компонентами, испытывающими фазовый переход [38].

На основании проведенного моделирования можно сделать вывод, что предложенная схема опи-



Рис. 7. Ударные адиабаты германия в переменных волновая скорость-массовая скорость; расчет: 1 - Ge I; 2 - Ge II, модель ТРМ2; $3 - \text{расчет с учетом фазового перехода фаз германия Ge I-Ge II по модели ТРМ [10]; <math>4 - \text{при волновой скорости } D = 4.3 \text{ км/с; эксперимент: } 5 - [2], 6 - [54], 7 - [36].$

 $\triangle 3$ $\diamond 4$ $\diamond 5$

 σ 2.5

2.0



Рис. 8. Ударные адиабаты сплавов золота и германия по модели ТРМ [10] в переменных волновая скорость-массовая скорость; эксперимент: 1 - Au(94.2 мас. %)Ge(5.8), 2 - Au(92.1)Ge(7.9), 3 - Au(90.7)Ge(9.3).

сания термодинамических параметров при высоких динамических нагрузках позволяет описывать поведение чистого германия и материалов с ним в качестве компонента. Показано хорошее соответствие результатов расчетов данным, полученным на основании экспериментов для сплавов германия с золотом. Отклонение расчетных точек на рис. 7 от данных, полученных на основании эксперимента [2] при значении волной скорости 7 км/с для Ge II, возможно, связано с наличием фазовых переходов при более высоких давлениях. В данной работе рассмотрено только фазовое превращение германия I–II. При наличии экспериментальных данных, которые позволят достоверно определить другие области фазовых переходов, авторская модель может быть использована и в этом случае. На данный момент существует много работ по описанию фазовых переходов в германии. Однако наличие выпадающих точек и высокий уровень интереса к данному материалу подтверждает необходимость дальнейших работ в этом направлении.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе построены термодинамически согласованные малопараметрические уравнения состояния для германия двух фаз Ge I и Ge II. Определены параметры уравнений, позволяющие достоверно описывать значения теплоемкости, энтропии, энтальпии и термодинамического потенциала Гиббса германия для двух фаз. Построены ударные адиабаты германия в диапазоне от 1 до 400 ГПа. При малом количестве параметров, определяемых по соответствию экспериментальным данным, получено достоверное описание ударно-волнового нагружения германия. Результаты численного моделирования хорошо соответствуют данным, полученным на основании экспериментов, и не противоречат расчетам других авторов. Описанная модель может быть полезной при расчетах термодинамических параметров материалов с компонентами, которые испытывают фазовые переходы при высокоэнергетическом воздействии.

Работа выполнена при поддержке бюджетного проекта III.22.3.1.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *Chen X., Zhang C., Meng Y., Zhang R., Lin H., Struzhkin V.V., Mao H.* β-tin → Imma → sh Phase Transitions of Ge // Phys. Rev. Let. 2011. V. 106. P. 135502.
- Павловский М.Н. Образование металлических модификаций Ge и Si в условиях ударного сжатия // ФТТ. 1967. Т. 9. № 11. С. 3192.
- 3. Станкус С.В., Хайрулин Р.А., Тягельский П.В. Термические свойства германия и кремния в конденсированном состоянии // ТВТ. 1999. Т. 37. № 4. С. 559.
- 4. Александрова М.М., Бланк В.Д., Буга С.Г. Фазовые переходы в Ge и Si в условиях деформации сдвига под давлением до 12 ГПа и *P*-*T*-γ диаграммы этих элементов // ФТТ. 1993. Т. 35. № 5. С. 1308.
- Principi E., Decremps F., Di Cicco A., Datchi F., De Panfilis S., Filipponi A., Polian A. Pressure Induced Phase Transitions in Amorphous Ge // Phys. Scr. 2005. V. 115. P. 381.
- 6. *Claeys C., Simoen E.* Germanium-based Technologies from Materials to Devices. Amsterdam: Elsevier, 2007.
- Chroneos A., Bracht H. Diffusion of n-type Dopants in Germanium // Appl. Phys. Rev. 2014. V. 1. P. 011301.
- Свойства элементов. Спр. изд. / Под ред. Дрица М.Е. М.: Металлургия, 1985. 672 с.
- 9. *Магомедов М.Н*. Об уравнении состояния и свойствах различных полиморфных модификаций Si и Ge // ФТТ. 2017. Т. 59. № 6. С. 1065.
- Maevskii K.K. Germanium and Germanium–Gold Alloys under Shock Wave Loading // Math. Montisnigri. 2021. V. 50. P. 140.
- Vohra Y.K., Brister K.E., Desgreniers S., Ruoff A.L., Chang K.J., Cohen M.L. Phase-transition Studies of Germanium to 1.25 Mbar // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 1944.
- Malone B.D., Cohen M.L. Electronic Structure, Equation of State, and Lattice Dynamics of Low-pressure Ge Polymorphs // Phys. Rev. B. 2012. V. 86. P. 054101.
- Ломоносов И.В., Фортова С.В. Широкодиапазонные полуэмпирические уравнения состояния вещества для численного моделирования высокоэнергетических процессов // ТВТ. 2017. Т. 55. № 4. С. 596.
- 14. Чарахчьян А.А., Милявский В.В., Хищенко К.В. Применение моделей смеси для анализа ударно-волновых экспериментов с неполным фазовым превращением // ТВТ. 2009. Т. 47. № 2. С. 254.
- 15. *Khishchenko K.V.* Equation of State for Vanadium at High Pressures // J. Phys.: Conf. Ser. 2021. V. 1787. P. 012001.
- 16. *Holzapfel W.B.* Equations of State for Cu, Ag, and Au and Problems with Shock Wave Reduced Isotherms // High Press. Res. 2010. V. 30. № 3. P. 372.
- 17. Kadatskiy M.A., Khishchenko K.V. Theoretical Investigation of the Shock Compressibility of Copper in the

Average-atom Approximation // Phys. Plasmas. 2018. V. 25. P. 112701.

- Minakov D.V., Paramonov M.A., Levashov P.R. Consistent Interpretation of Experimental Data for Expanded Liquid Tungsten near the Liquid-gas Coexistence Curve // Phys. Rev. B. 2018. V. 97. P. 024205.
- Krivosheina M.N., Tuch E.V. Equations of State in Materials Beyond the Assumption of Isotropy of Volume Compressibility // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. V. 1128. P. 012102.
- Maevskii K.K. Thermodynamic Parameters of Lithium Deuteride in Pressure Range 5-1000 Gigapascals // Math. Montisnigri. 2018. V. 41. P. 123.
- 21. *Гилев С.Д.* Малопараметрическое уравнение состояния алюминия // ТВТ. 2020. Т. 58. № 2. С. 179.
- 22. *Tonkov Yu.E., Pomyatovsky E.G.* Phase Transformations of Elements under High Pressure. Boca Raton: CRC Press, 2004. 390 p.
- 23. Верещагин Л.Ф., Зубова Е.В., Бурдина К.П. Получение плотных модификаций германия и кремния в условиях одновременного действия высокого давления и напряжения сдвига // Докл. АН СССР. 1966. Т. 168. № 2. С. 314.
- Okai B., Yoshimoto T. Stress-induced Phase Change of Single-Crystalline GaSb, InAs, and Ge // J. Phys. Soc. Japan. 1978. V. 45. P. 1887.
- Qadri S.B., Skelton E.F., Webb A.W. High Pressure Studies of Ge Using Synchrotron Radiation // J. Appl. Phys. 1983. V. 54. P. 3539.
- Meade C., Jeanloz R. Acoustic Emissions and Shear Instabilities During Phase Transformations in Si and Ge at Ultrahigh Pressures // Nature. 1989. V. 39. P. 616.
- Blank V.D., Malyushitskaya Z.V. Structural Mechanisms of the Si(Ge) I–III Phase Transformations // Acta Crystallogr. A. 1990. V. 96. P. 348.
- 28. Александрова М.М., Бланк В.Д., Буга С.Г. Фазовые переходы в Ge и Si в условиях деформации сдвига под давлением до 12 ГПа и *P*−*T*−γ-диаграммы этих элементов // ФТТ. 1993. Т. 35. № 5. С. 1308.
- Imai M., Mitamura T., Yaoita K., Tsuji K. Pressure-induced Phase Transition of Crystalline and Amorphous Silicon and Germanium at Low Temperatures // High Pres. Res. 1996. V. 15. P. 167.
- Principi E., Decremps F., Di Cicco A., Datchi F., De Panfilis S., Filipponi A., Polian A. Pressure Induced Phase Transitions in Amorphous Ge // Phys. Scr. 2005. V. 115. P. 381.
- Krueger B.R., Vreeland T. A Hugoniot Theory for Solid and Powder Mixtures // J. Appl. Phys. 1991. V. 69. P. 710.
- Nayak B., Menon S. Non-equilibrium Theory Employing Enthalpy-based Equation of State for Binary Solid and Porous Mixtures // Shock Waves. 2018. V. 28. P. 141.
- Maevskii K.K., Kinelovskii S.A. Thermodynamic Parameters for Mixtures of Quartz under Shock Wave Loading in Views of the Equilibrium Model // AIP Conf. Proc. 2015. V. 1683. P. 020132.
- McQueen R.G., Marsh S.P., Taylor J.W., Fritz J.N., Carter W.J. The Equation of State of Solids from Shock Wave Studies. In: High Velocity Impact Phenomena / Ed. Kinslow R. N.Y.: Acad. Press, 1970. P. 293.
- 35. Zhang C., Jin Y., Kong P., Li S., Chen S., Zhang W., Cheng S., He K., Dai W. Theoretical Investigations on the Structural Stability, Structural and Physical Properties, and Bonding Feature for RuX (X = Si, Ge, Sn) with B20 and B2 Phases // Mater. Today Commun. 2020. V. 24. P. 101116.

- LASL Shock Hugoniot Data / Ed. Marsh S.P. Berkeley: Univ. of California Press, 1980. 658 p.
- 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. P. 87.
- 38. Маевский К.К., Кинеловский С.А. Термодинамические параметры смесей с нитридом кремния при ударно-волновом воздействии в представлениях равновесной модели // ТВТ. 2018. Т. 56. № 6. С. 876.
- 39. *Маевский К.К.* Численное исследование ударноволнового нагружения металлических композитов на базе W и WC // ЖТФ. 2021. Т. 91. № 5. С. 815.
- Maevskii K.K., Kinelovskii S.A. Shock Wave Loading of High-strength Ceramics with Components Undergoing Phase Transitions // AIP Conf. Proc. 2016. V. 1783. P. 020143.
- 41. *Maevskii K.K.* Modelling of Polymorphic Phase Transitions under Shock Wave Loading // AIP Conf. Proc. 2019. V. 2103. P. 020009.
- Маевский К.К., Кинеловский С.А. Численное моделирование термодинамических параметров высокопористой меди // ЖТФ. 2019. Т. 89. № 8. С. 1158.
- 43. *Маевский К.К.* Численное моделирование термодинамических параметров углерода // ТВТ. 2021. Т. 59. № 5. С. 701.
- 44. Милявский В.В., Фортов В.Е., Фролова А.А., Хищенко К.В., Чарахчьян А.А., Шуршалов Л.В. Расчет ударного сжатия пористых сред в конических твердотельных мишенях с выходным отверстием // ЖВМиМФ. 2006. Т. 46. № 5. С. 913.
- 45. *Menoni C.S., Hu J.Z., Spain I.L.* Germanium at High Pressures // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. № 1. P. 362.
- Бацанов С.С. Структурная химия. Факты и зависимости. М.: Диалог–МГУ, 2000. 292 с.
- 47. Pandya T.C., Thakar N.A., Bhatt A.D. Analysis of Equations of State and Temperature Dependence of Thermal Expansivity and Bulk Modulus for Silicon // J. Phys.: Conf. Ser. 2012. V. 377. P. 012097.
- 48. *Kwon T.H., Kim S.C.* Thermal Properties of NaCl Crystal under High Pressure // Physica B. 1995. V. 205. № 3. P. 331.
- 49. Физические величины. Спр. / Под ред. Григорьева И.С., Мейлихова Е.З. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
- 50. Таблицы физических величин / Под ред. Кикоина И.К. М.: Атомиздат, 1976. 1008 с.
- Гуревич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Т. II. Кн. 1. М.: Наука, 1979. 440 с.
- Гуревич Л.В., Вейц И.В., Медведев В.А. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Т. II. Кн. 2. М.: Наука, 1979. 344 с.
- 53. Рехвиашвили С.Ш., Кунижев Х.Л. Исследование влияния решеточного ангармонизма на теплоемкость алмаза, кремния и германия // ТВТ. 2017. Т. 55. № 2. С. 320.
- Compendium of Shock Wave Data / Ed. van Thiel M. Report UCRL-50108. Livermore: Lawrence Livermore Laboratory, 1977.
- 55. Острик А.В. Построение уравнений состояния композиционных материалов из аморфных компонентов в области ударных сжатий и с учетом зависимости теплоемкости от температуры // Конструкции из композиционных материалов. 2018. Т. 2. С. 48.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР том 60 № 6 2022