

Согласование термодинамических свойств на линии плавления титана: проблемы, результаты

© Е.Ю. Кулямина, В.Ю. Зицерман, Л.Р. Фокин

Объединенный институт высоких температур РАН,
125412 Москва, Россия
e-mail: kulyamina.elena@gmail.com

(Поступило в Редакцию 8 июня 2017 г.)

Проведены анализ и согласование опытных данных о термодинамических свойствах на линии плавления титана в области от атмосферного давления до 90 ГПа. Обсуждены проблемы: а) неполноты данных о плотности твердой β -фазы в области нормальной температуры плавления, б) вероятности образования на линии плавления тройной точки сосуществующих β , ω и жидкой фаз титана. Для оценки скачков объема при плавлении $3d$ -элементов периодической системы предложена и эффективно использована корреляция скачков объема ΔV_m и энтропии ΔS_m на линии плавления при атмосферном давлении.

DOI: 10.21883/JTF.2018.03.45594.2382

Введение

Через два года научная общественность будет отмечать 150 лет со времени первой публикации Д.И. Менделеева о периодической системе (ПС) элементов. За прошедшее время уровень знаний о свойствах элементов вырос многократно, возникло и развивается направление работ по корреляции свойств. И в то же время имеются разительные примеры неполноты данных о свойствах элементов не только в новых, но и в старых, традиционных областях исследования свойств. В круге наших научных интересов находятся вопросы согласования термодинамических свойств на линии плавления при температуре выше 1500–2000 К. Интерес к этой проблеме связан с тем, что: а) при столь высоких температурах традиционные методы экспериментальных исследований линий плавления веществ типа „поршень цилиндр“ не работают. Находят применение новые методы статических и динамических исследований, при этом достоверность соответствующих результатов нуждается в анализе и тестировании; б) при разработке широкодиапазонных параметрических уравнений состояния (УС) тугоплавких веществ [1] опытные данные о равновесии твердой и жидкой фаз являются естественным источником информации для определения параметров УС, с одной стороны, и используются для оценки качества самих УС, с другой; в) в последние десятилетия широкое развитие получили методы математического моделирования свойств конденсированных веществ на базе определяемых тем или иным способом, в прямой или обратной постановке задачи эффективных потенциалов межчастичных взаимодействий [2]. При этом опытные $T_m(p)$ данные, информация о производных dT_m/dp на линии плавления используются для оценки качества результатов моделирования.

Наш опыт построения линий плавления тугоплавких металлов платиновой группы Ru ($T_m^0 = 2607$ К), Ir ($T_m^0 = 2707$ К), Os ($T_m^0 = 3320$ К) [3] показывает, что для

этих элементов ПС отсутствуют не только надежные $T_m(p)$ данные при высоких давлениях, но и оценки производной на начальном участке линии плавления

$$\left. \frac{dT_m}{dp} \right|_{p \rightarrow 0} = \frac{\Delta V_m}{\Delta S_m}, \quad (1)$$

где $\Delta V_m, \Delta S_m$ — скачки объема и энтропии в процессе плавления. Значение этой производной используется при анализе согласования опытных данных при высоком и атмосферном давлениях.

Основная цель работы заключается, с одной стороны, в том, чтобы провести анализ и согласование данных на линии плавления титана при высоких и низких давлениях и, с другой, показать неполноту и противоречивость информации на линии плавления элементов ПС, в частности титана, и необходимость в проведении исследований метрологического уровня факторов, влияющих на результаты измерений при высоких давлениях и температурах.

Линия плавления титана

Титан второй после скандия $3d$ -элемент ПС, $N = 22$, молекулярный вес $M = 47.88$, внешняя электронная оболочка атома $3d^2 4s^2$. При нагреве при атмосферном (нормальном) давлении гексагональная α -фаза испытывает при $T = 1156 \pm 3$ К полиморфный α - β -переход, который происходит с уменьшением объема $\delta V = -0.12 \pm 0.02\%$. Новая β -фаза имеет ОЦК структуру, ее температура плавления $T_m^0 = 1944 \pm 3$ К [4]. В справочниках по фазовым диаграммам элементов ПС [5,6] информация о линии плавления Ti отсутствует, и только в новом издании [7] появляется сообщение о первом исследовании плавления β -фазы под давлением в интервале 15–80 ГПа.

Еррандонеа и совторы [8] опубликовали результаты измерений температуры плавления W, Ta, Mo, V, Ti

в интервале давлений 15–90 GPa, используя метод алмазных наковален (DAC-метод) с лазерным нагревом образца и определением момента плавления визуально или по термограмме процесса нагрева. Температура определялась с помощью многолучевого пирометра с использованием уравнения Планка для перехода от интенсивности излучения к термодинамической шкале температур. При этом проблема определения степени черноты образца на разных длинах волн, потери излучения по оптическому тракту в этой работе не обсуждаются, хотя оценки неопределенности температуры за счет этих факторов в подобных опытах могут достигать 10–15%, т.е. в рассматриваемой области высоких температур величины 200–300 K [9]. Метод алмазных наковален является развитием метода измерения равновесия твердой и жидкой фаз при высоких давлениях с применением омического нагрева металла и использованием прозрачных в оптическом диапазоне веществ типа NaCl [10]. При реализации DAC-метода обычно лепесток металлического образца помещается в прокладки (рений и т.п.), чтобы избежать химического взаимодействия образца с алмазом и уменьшить темп нагрева последнего. Опыты, как правило, проводятся при давлениях выше 10 GPa, чтобы избежать возможной графитизации алмаза при более низких давлениях. Известно, что для титана пленка кислорода, которая обычно образуется на поверхности α -фазы, переходит в объем после α - β -перехода. Этот вопрос и проблема чистоты атмосферы в рассматриваемых опытах также не обсуждается. При экстраполяции опытных $T_m(p)$ данных работы [8] на низкие давления для Mo и Ti можно получить низкие значения для начального наклона линии плавления $(dT_m/dp)_{p \rightarrow 0} = 7-10 \text{ K} \cdot \text{GPa}^{-1}$. Это противоречит традиционным оценкам этой величины для ряда других тугоплавких металлов [11] и, вообще говоря, ставит под сомнение достоверность рассматриваемых опытов. Относительно молибдена, его линии плавления и производной $(dT_m/dp)_{p \rightarrow 0}$ имеется обширная литература, и современная оценка составляет $35-40 \text{ K} \cdot \text{GPa}^{-1}$ [12]. В обзоре 2006 г. [13] Еррандонеа повторяет рисунок с опытными данными на линии плавления титана, приводит новые примеры расхождения опытных данных на линии плавления элементов, полученных DAC-методом, и подчеркивает необходимость в проведении дальнейших исследований.

Для титана результаты новых измерений при давлениях до 118 GPa и температурах до 2850 K были опубликованы только в 2015 г. [14]. Авторы использовали тот же DAC-метод с лазерным нагревом образца. Процесс плавления дополнительно фиксировался с помощью гамма-спектрометра по потере кристалличности образца. По мнению авторов этой работы, ранее в [8] при проведении измерений для титана могли наблюдать не плавление, а процесс рекристаллизации неотожженного образца при температуре ниже температуры плавления.

Влияние микроструктуры, состояния поверхности, чистоты исходных образцов металла на результаты измерений процессов при ударном сжатии титана отмечается также в работе [15]. В работе [14] приводятся 7 опытных точек $T_m(p)$ в интервале давлений 47–118 GPa. Одновременно в этой работе приведены для титана результаты *ab initio* молекулярно-динамических расчетов и затем в разных приближениях (однофазная и двухфазная модели плавления) оценки линии плавления. Результаты расчетов по двухфазной модели (твердая–жидкая фазы) близки к опытным данным и представлены в работе уравнением Симона:

$$T_m = T_m^0(1 + p/p^*)^{1/c}, \quad (2)$$

где $T_m^0 = 1941 \text{ K}$, $p^* = 7.0 \text{ GPa}$, $c = 7.19$. Для многих металлов ПС коэффициент $c = 1.5$ [3]. В то же время, например в работе [16], при обобщении данных на линии плавления никеля этот параметр оказался равным $c = 4.5$. При рассмотрении широкого спектра значений c для уравнения Симона надо иметь в виду, что само уравнение носит эмпирический характер. Этой форме уравнения соответствует следующая связь с термодинамическими свойствами на линии плавления: $c(p + p^*) = T_m \Delta S / \Delta V$. При нормальных условиях производная $(dT_m/dp)_{p \rightarrow 0} = T_m^0 / (cp^*)$ и для приведенных выше параметров из работы [14] для титана она равна $38.6 \text{ K} \cdot \text{GPa}^{-1}$ и согласуется с оценкой этой величины для ряда других d -металлов [11]. С другой стороны, проведенная нами аппроксимация опытных $T_m(p)$ данных для титана [14] в рамках метода наименьших квадратов (МНК) говорит о том, что коэффициент корреляции c , p^* параметров $r \rightarrow 1$, и нужна дополнительная информация для уточнения параметров и анализа согласованности данных для титана при низком и высоком давлении.

Для титана имеется ряд публикаций, в которых приводятся результаты расчетов термодинамических свойств различных твердых фаз и жидкости, а также данные о фазовом равновесии между ними в широком интервале давлений и температур. В работах [17,18] расчеты проведены на базе широкодиапазонных УС, в работах [19,20] — с помощью метода молекулярной динамики (МД) (модели погруженного атома). Оценки производной в [17,19,20] $(dT_m/dp)_{p \rightarrow 0} \approx 50 \text{ K} \cdot \text{GPa}^{-1}$. В работе 2005 г. [18], опубликованной до появления опытных данных [14], производная $(dT_m/dp)_{p \rightarrow 0} \approx 7 \text{ K} \cdot \text{GPa}^{-1}$, и на рисунке показана тройная точка равновесия двух твердых β , ω и жидкой фаз при давлении $\sim 40 \text{ GPa}$.

Можно отметить, что приведенные выше оценки производной $(dT_m/dp)_{p \rightarrow 0}$ в основном значительно выше, чем в экспериментальной работе 2001 г. [8]. Для уточнения этих оценок естественно обратиться к расчету производной по уравнению Клапейрона–Клаузиуса и проанализировать опытные данные по скачкам объема ΔV_m и энтропии плавления ΔS_m титана при атмосферном давлении.

Атмосферное давление

Что касается величины $\Delta S_m = \Delta H_m/T_m$, то в свое время при работе над монографией [4] была проведена совместная МНК-аппроксимация опытных данных по декрементам энтальпии и теплоемкости α -, β -фаз и жидкого титана в интервале температур 300–2430 К и получена оценка $\Delta H_m = 14.39 \pm 0.9 (3\sigma) \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ с относительной погрешностью $\delta\Delta H_m \approx 6\%$. С этой величиной практически совпадает оценка $\Delta H_m = 14.15 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ из широко распространенного обзора [21].

Для титана прямые измерения величины скачка объема ΔV_m отсутствуют. Это связано, в частности, с высокой химической активностью особенно жидкого титана, что затрудняет выбор материала контейнера для проведения опытов в стационарных условиях [22]. В работах 80-х годов прошлого века по импульсному нагреву проводника током, например, в работе [23] для титана изменение объема при плавлении показано лишь на графике в небольшом масштабе, откуда трудно выделить величину скачка и оценить его неопределенность. На пути оценки величины скачка, т.е. разницы объемов сосуществующих фаз $\Delta V_m = V_l(T_m^0) - V_s(T_m^0)$, возникает проблема оценки плотности $d(T_m^0) = 1/V(T_m^0)$ и ее неопределенности, как можно будет видеть, в первую очередь, для твердой фазы при температуре плавления.

Для анализа согласования опытных $T_m(p)$ данных титана при высоких давлениях с величиной производной $(dT_m/dp)_{p \rightarrow 0}$ желательно для последней располагать оценкой неопределенности $\delta((dT_m/dp)_{p \rightarrow 0}) < 25\text{--}30\%$ и для величины скачка объема, имея в виду приведенную выше погрешность скачка энтропии, оценкой $\delta(\Delta V_m) < 20\text{--}25\%$. Имеющиеся в литературе данные о плотности жидкого титана при нормальной температуре плавления, например, $d_l(T_m^0) = 4.13 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ [4] и оценки для скачка объема $\Delta V_m \approx 2.5\%$ позволяют сделать грубую оценку погрешности $\delta(\Delta V_m)$. Если сумма погрешностей значений плотности твердой и жидкой фаз будет равна $0.04 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, т.е. в сумме 1%, то мы получим оценку $\delta(\Delta V_m) \approx 40\%$. Что касается плотности жидкого титана, то в настоящее время известны результаты трех независимых измерений $d_l(T_m^0)$, $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$: 4.14 ([24] метод электромагнитной левитации капли), 4.13 ([25] метод висящей капли, электронно-лучевой нагрев образца), 4.17 ([26] метод электростатической левитации капли), среднее из которых с учетом погрешности отдельных данных составляет $4.14 \pm 0.02 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$. Надо отметить, что авторами работ [25,26] разными методами проведены измерения плотности $d_l(T_m^0)$ практически всех тугоплавких металлов в интервале температур 1500–3700 К. Расхождение этих опытных данных не превышает 1%, что является свидетельством высокого уровня современных теплофизических исследований.

Для высокотемпературной ОЦК β -фазы титана известны лишь две работы, в которых приводятся опытные данные по линейному коэффициенту теплового расширения (ЛКТР) до температуры 1600–1650 К [27,28].

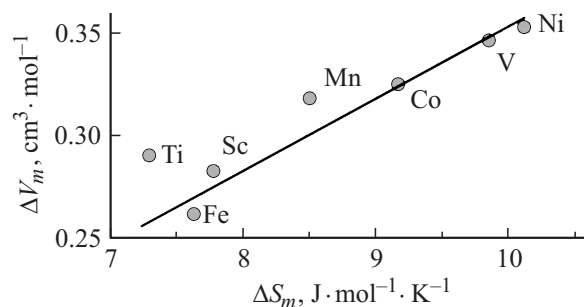


Рис. 1. Корреляция данных $\Delta V_m = f(\Delta S_m)$. В масштабе графика $K = \Delta V_m \cdot 1000/\Delta S_m$.

Высокая химическая активность и заметная текучесть образца не позволили провести дилатометрические измерения линейного расширения при более высоких температурах. Оценка плотности твердого титана $d_s(T_m^0) = 4.26 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ была получена при экстраполяции ЛКТР на 300 К до температуры плавления [4]. Погрешность этого значения плотности, имея в виду все особенности поведения твердой фазы при подходе к T_m^0 , трудно оценить менее 1.5%. При этом оценка погрешности скачка объема $\delta(\Delta V_m) \approx 80\%$, что делает бесперспективным использование рассматриваемых данных о скачке объема ΔV_m для анализа согласованности данных на линии плавления при высоких и низких давлениях.

В этой ситуации мы рассмотрели возможности другого метода оценки величины ΔV_m , основанного на анализе зависимости $\Delta V_m = f(\Delta S_m)$ для 3d-элементов ПС. В качестве информации о скачках энтропии были использованы значения в основном из обзора [21]. В качестве „опытных“ данных для скачков объема были приняты значения $\Delta V_m = \delta(\Delta V_m)V_l(T_m^0)$, где $\delta(\Delta V_m)$ — оценки относительных погрешностей скачков объема из обзора Станкуса [22], значения $V_l(T_m^0)$ — опытные данные [25]. Из обработки для 3d-элементов были исключены данные для хрома по двум причинам: 1) электронная оболочка атома Cr... $3d^5s^1$ отличается от структуры... $3d^n s^2$ других 3d-элементов, 2) физико-химические свойства в твердой фазе имеют особенности по сравнению со свойствами других элементов этого периода [29]. В 2015 г. были опубликованы результаты новых измерений плотности твердого и жидкого никеля, полученные в Институте теплофизики СО РАН [30] с использованием метода дилатометра для твердой фазы и метода гамма-излучения для обеих фаз. Рекомендуемое в этой работе значение скачка объема и оценка его погрешности $\Delta V_m = (4.07 \pm 0.15)\%$ использованы нами в дальнейшей обработке. Как показал анализ, рассматриваемый массив семи „опытных“ точек можно описать с помощью простой зависимости $\Delta V_m = K\Delta S_m$, где параметр K и его статистическая оценка погрешности 3σ равны $K = 35.3 \pm 1.2 \text{ K} \cdot \text{GPa}^{-1}$. Параметры более сложных моделей на этом массиве данных оказываются

незначимыми. Результаты аппроксимации показаны на рис. 1. Разброс точек в первом приближении носит случайный характер. Если ориентироваться не на статистическую оценку погрешности модели 3%, а на максимальный разброс точек, то оценка погрешности $\delta K = 10\%$, и именно эту оценку мы используем далее при согласовании данных. Для титана расчетные значения $\Delta V_m = 0.257 \pm 0.026 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ и плотность твердой фазы $d_s(T_m^0) = 4.22 \pm 0.03 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$.

Проблема тройной точки β - ω -жидкая фаза

Далее мы рассматриваем линию плавления $T_m(p)$ β -фазы титана в интервале от атмосферного давления до 90–100 GPa. При этом надо иметь в виду следующее обстоятельство. У металлов, которые в твердой фазе имеют разные полиморфные формы, линия равновесия последних может пересекать линию плавления и при этом возникает тройная точка двух твердых фаз и жидкости. Классическим, хорошо изученным примером такой ситуации является тройная точка равновесия ГЦК–ОЦК–жидкая фаза железа при давлении 5.2 GPa и температуре 1990 K [5]. В твердом титане кроме полиморфных α - и β -модификаций существует гексагональная ω -фаза [7]. После тройной точки α - β - ω -фаз (8 GPa, 910 K) линия равновесия β - ω -фаз в T_m - p -координатах идет вверх. Ф. Банди в 1963 г. провел измерения на линии равновесия этих фаз в интервале давлений 8–12 GPa и определил величину наклона $dT_{\beta\omega}/dp \approx 20 \text{ K} \cdot \text{GPa}^{-1}$ [31]. Естественно задать вопрос: может ли линия равновесия β - ω -фаз с ростом давления пересечь линию плавления β -фазы, после чего надо будет рассматривать плавление ω -фазы. В 2012 г. опубликованы результаты новых измерений плотности Ti, Zr, Hf, полученные с помощью метода алмазных наковален при температурах до 2200 K и давлениях до 35 GPa [32]. Используя расчетные CALPHAD-процедуры, автор построил УС твердых фаз этих металлов, включая линии равновесия фаз. Для титана линия равновесия β - ω -фаз построена от тройной точки до 35 GPa и 1800 K. При высоких давлениях значение наклона этой линии равно $dT_{\beta\omega}/dp \approx 40 \text{ K} \cdot \text{GPa}^{-1}$. При ее экстраполяции вверх до 60 GPa можно видеть, что линия β - ω -равновесий может пересечь линию плавления $T_m(p)$ данных из работы [14]. В то же время авторы работы [14] предварительно провели с помощью DAC-метода детальные исследования свойств и равновесий α - β - ω -фаз в широком интервале параметров [33], в частности, измерения параметра решетки ОЦК β -фазы в интервале давлений 35–75 GPa. Это позволяет считать, что в работе [14] получены опытные данные именно для плавления β -фазы. Тем самым мы можем предположить, что если линия β - ω -равновесий и пересекает линию плавления, то это может происходить при давлениях выше 90–100 GPa.

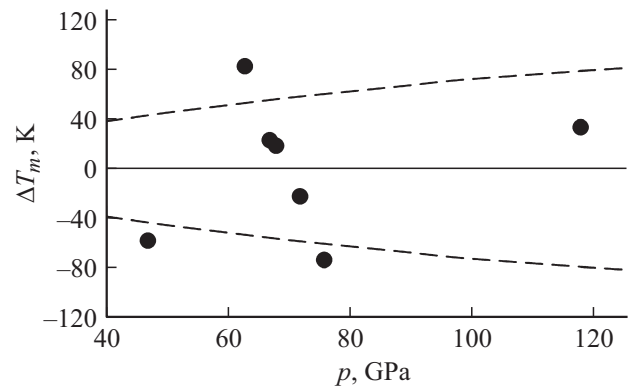


Рис. 2. Результаты аппроксимации данных.

Результаты согласования данных

Следуя логике работы 2015 г. [14], мы провели совместную обработку данных на линии плавления титана, используя информацию об опытных $T_m(p)$ данных из этой работы и нашу оценку производной $(dT_m/dp)_{p \rightarrow 0}$. В качестве модели линии плавления принято трехпараметрическое уравнение Симона (2), где c и p^* — варьируемые параметры. Совместная обработка опытных данных (7 точек $T_m(p)$ с погрешностью $\Delta T_m = 200 \text{ K}$ из работы [14]) и значения наклона c с погрешностью $\Delta((dT_m/dp)_{p \rightarrow 0}) = 4 \text{ K} \cdot \text{GPa}^{-1}$ проведена в рамках весового нелинейного МНК. В качестве априорной информации использована оценка параметра $c = 7 \pm 3$. МНК функционал $S = 0.43$, отклонение опытных данных от расчетной зависимости носит случайный характер и не превышает принятых погрешностей. Параметры $p^* = 7.81 \pm 1.62 \text{ GPa}$, $c = 7.04 \pm 0.88$, коэффициент корреляции ошибок параметров, выраженный через элементы матрицы ошибок МНК, $r = \text{cov}(cp^*) / (D(c)D(p^*))^{0.5} = 0.89$. Если в обработке использовать только опытные $T_m(p)$ данные, коэффициент $r \rightarrow 1$. Для оценки доверительных погрешностей расчетных значений $\Delta_p Y$ при доверительной вероятности P использовано в первом приближении стандартное выражение правила переноса случайных ошибок [34]. Принято $P \approx 0.9$, коэффициент согласия (coverage factor) $t_p = 5$ с учетом допущений для использованного варианта МНК (независимые оценки погрешностей опытных данных, бедная статистика и т. п.). Разброс опытных данных $T_m(p)$ относительно сглаживающей зависимости и коридор погрешностей $\Delta_p Y$ в интервале давлений до 90 GPa показаны на рис. 2.

Заключение

1. Проведено согласование выбранных на основе критического анализа данных на линии плавления титана при низком и высоком давлении до 90 GPa. Остается открытым вопрос о возможности появления тройной точки

β -, ω - и жидкой фаз на линии плавления при давлении > 100 ГПа. Отсутствие опытных данных о плотности твердого титана от 1600 К до температуры плавления и прямых измерений скачка объема затрудняет всю процедуру согласования.

2. Продемонстрирована и использована в дальнейшей обработке линейная зависимость величин скачков объема и энтропии при плавлении d -элементов Sc, Ti, V, Co, Mn, Fe, Ni при нормальном давлении.

3. Приведенные выше оценки доверительных погрешностей величин на линии плавления основаны на вероятностных представлениях, и для оценки надежности полученных результатов нужны дополнительные исследования на линии плавления титана.

4. Для анализа причин расхождения результатов определения $T_m(p)$ данных, полученных методом алмазных наковален в работах разных групп авторов, необходимы дополнительные исследования на метрологическом уровне факторов, влияющих на достоверность результатов.

5. Работа может рассматриваться как дополнительная глава монографии по теплофизическим свойствам титана и его сплавов [4].

Статья подготовлена при поддержке гранта РФФИ 17-08-00736.

Список литературы

- [1] Бушман А.В., Фортвов В.Е. // УФН. 1983. Т. 140. Вып. 2. С. 177–232.
- [2] Белашенко Д.К. // УФН. 2013. Т. 183. Вып. 12. С. 1281–1322.
- [3] Кулямина Е.Ю., Зицерман В.Ю., Фокин Л.Р. // ЖТФ. 2017. Т. 87. Вып. 1. С. 59–64.
- [4] Chekhovskoi V.Ya., Fokin L.R., Peletskii V.E., Petukhov V.A., Shur V.A. Handbook of titanium-based materials: Thermophysical properties, data and studies. NY: Begell house, 2007. 275 p.
- [5] Тонков Е.Ю. Фазовые диаграммы элементов при высоких давлениях М.: Физматлит, 1979. 192 с.
- [6] Yang D.A. Phase diagrams of elements. L.: Univ. California Press, 1991. 284 p.
- [7] Tonkov E.Yu., Ponytovsky E.G. Phase transformation of elements under high pressure. Boca Raton: CRC press, 2007. 380 p.
- [8] Errandonea D., Schwager B., Ditz R. et al. // Phys. Rev. 2001. Vol. 63. P. 132104(13).
- [9] Shen G., Prakapenka V., Rivers M., Sutton S. // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. P. 185701.
- [10] Vereshagin L.F., Fateeva N.S. // High Temp.–High Press. 1977. Vol. 9. P. 619–628.
- [11] Фокин Л.Р. // Мониторинг. Наука и технологии. 2011. № 4. С. 103–107.
- [12] Hrubciak R., Meng Y., Shen G. // Nature Commun. 2017. Vol. 8:14562.
- [13] Errandonea D. // J. Phys. Chem. Sol. 2006. Vol. 67. P. 2018–2037.
- [14] Stutzmann V., Dewaele A., Bouchet J. et al. // Phys. Rev. B. 2015. Vol. 92. P. 224110(10).
- [15] Трунин Р.Ф., Симаков Г.В., Медведев А.В. // ТВТ. 1999. Т. 37. Вып. 6. С. 881–886.
- [16] Errandonea D. // Phys. Rev. B. 2013. Vol. 87. P. 054108(5).
- [17] Kerley G. Equation of state for titanium and Ti6Al14V alloy. Rt. SAND 2003–3758. Sandia Nat. Lab. Albuquerque, USA, 2003. 28 p.
- [18] Pecker S., Eliezer S., Fisher D., Hines Z. // J. Appl. Phys. 2005. Vol. 98. P. 043516(12).
- [19] Kim Y.-M., Lee B.-J., Baskes M.I. // Phys. Rev. 2006. Vol. 74. P. 014101(12).
- [20] Zeng Z.-Y., Cai L.-C., Chen X.-R., Jing F.-Q. // J. Appl. Phys. 2011. Vol. 109. P. 043503(7).
- [21] Dinsdale A.T. // CALPHAD. 1991. Vol. 15. N 4. P. 317–425.
- [22] Станкус С.В. Измерение плотности элементов при плавлении. Методы и экспериментальные данные. Новосибирск: Институт теплофизики СО РАН. Препринт № 247-91. 79 с.
- [23] Gathers G.R. // Int. J. Thermophys. 1983. Vol. 4. N 3. P. 271–278.
- [24] Sato T., Shiraishi Y., Sakuma Y. // Trans. Iron and Steel Inst of Japan. 1969. Vol. 9. P. 118–126.
- [25] Физическая химия неорганических материалов. Т. 2: Поверхностное натяжение и термодинамика металлических расплавов / Еременко В.Н., Иванов М.И., Лукашенко Г.М. и др. Киев: Наукова думка, 1988. С. 59–103.
- [26] Ishikawa T., Paradis P.-F. // Adv. Mater. Res. 2009. Vol. 11. P. 173–195.
- [27] Williams D.N. // Trans. Met. Soc. AIME. 1961. Vol. 221. N 2. P. 411–412.
- [28] Schmitz-Pranghe N., Dunner P. // Z. Metallkunde. 1968. Vol. 58. N 5. P. 377–382.
- [29] Лякишев Н.П., Гасик М.И. Металлургия хрома. М.: ЭЛИЗ, 1999. 581 с.
- [30] Abdullaev R.N., Kozlovski Yu.M., Khairulin R.A., Stankus S.V. // Int. J. Thermophys. 2015. Vol. 36. N 4. P. 603–619.
- [31] Bundy F.P. GE Research Lab. Rep. N 63-RL-3184C. USA, October, 1963.
- [32] Hrubciak R. Exploring thermal and mechanical properties selected transition elements under extreme conditions: experiments at high pressures and high temperatures. Thesis: Florida Int. Univ. USA. 2012.
- [33] Dawaele A., Stutzmann V., Fouchet J. et al. // Phys. Rev. B. 2015. Vol. 91. P. 134108(13).
- [34] Фокин Л.Р., Калашиников А.Н. // ИФЖ. 2016. Т. 89. Вып. 1. С. 240–249.