

ЛИНИЯ ПЛАВЛЕНИЯ ЖЕЛЕЗА В УСЛОВИЯХ ЯДРА ЗЕМЛИ НА ОСНОВЕ ПЕРВОПРИНЦИПНЫХ РАСЧЕТОВ И АНАЛИЗА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

*Смирнов Г.С.,^{*1,2} Белоножко А.Б.^{1,3,4}*

¹НИУ ВШЭ, Москва, Россия, ²ОИВТ РАН, Москва, Россия, ³NJU,
Нанкин, Китай, ⁴КТН, Стокгольм, Швеция

**grsmrnov@gmail.com*

Железо является основным элементом ядра Земли и экзопланет земного типа. Достоверно известно, что в условиях внутреннего ядра Земли (давления 330–360 ГПа и температуры 5000–7000 К) железо находится в твердом состоянии, однако его кристаллическая модификация является предметом дискуссий. Также существует значительный разброс оценок линии плавления на основе экспериментов с ударными волнами и алмазными наковальнями, а также теоретическими оценками на основе расчетов с использованием теории функционала электронной плотности, классической и квантовой молекулярной динамики.

Последние экспериментальные данные обычно интерпретируются как доказательство стабильности ГПУ фазы железа при высоких температурах и давлениях, тогда как первопринципные молекулярно-динамические расчеты в сверхбольших ячейках указывают на существование ОЦК фазы. Маленькие расчетные ячейки (менее 1000 атомов) приводят к разрушению ОЦК структуры.

В данной работе проведен анализ плотностей, координационных чисел и структурных факторов кристаллических модификаций железа, который показывает совпадение расчетных и экспериментальных данных для ОЦК фазы. Эти данные ранее атрибутировали как ГПУ или жидкая фаза.

На основании двухфазного моделирования в больших ячейках вычислена кривая плавления железа в диапазоне 120–500 ГПа. Сравнены границы применимости псевдопотенциальных приближений.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ в 2022–2023 годах.