DOI:10.16410/j.issn1000-8365.2023.2362

基于 CALPHAD 的高温高压相图建模

王镤子愚[1],黄永兴[1],高兴誉[2],种晓宇[3],宋海峰[2]

(1. 昆明理工大学 材料科学与工程学院,云南 昆明 650093; 2. 北京应用物理与计算数学研究所,计算物理国防重点实验室,北京 100088; 3. 昆明理工大学 金属先进凝固成形与装备国家地方联合工程实验室,云南 昆明 650000)

摘　要:高温高压相图在物理化学、矿物学、地球科学和极端条件下的材料科学中都具有重要的地位和应用价值,相图计算方法(alculation of phase diagram, CALPHAD)是建立温度–压强热力学相图和热力学数据库的主要方法,可以计算材料体系的相平衡、组成相的相分数和相成分、热力学性质,一定程度上解决单一实验建立高温高压相图的困难。本文对基于 CALPHAD 的高温高压相图建模方法进行了详细介绍,并总结其当前面临的问题和下一步研究方向,为极端条件下材料设计和性能评估奠定基础。

关键词:热力学;相图计算方法;温度–压强相图;摩尔体积

中图分类号:TG113.14　　**文献标识码**:A　　**文章编号**:1000-8365(2023)02-0190-05

High Temperature and High Pressure Phase Diagram Modelling Based on CALPHAD

WANG Puziyu[1], HUANG Yongxing[1], GAO Xingyu[2], CHONG Xiaoyu[3], SONG Haifeng[2]

(1. Faculty of Materials Science and Engineering, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093, China; 2. Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China; 3. National and Local Joint Engineering Laboratory for Advanced Solidification Forming and Equipment for Metals, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650000, China)

Abstract: High temperature and high pressure phase diagrams have a very important position and application value in physical chemistry, mineralogy, earth science and material science under extreme conditions. Calculation of phase diagram (CALPHAD) method is the main method to establish temperature-pressure thermodynamic phase diagram and thermodynamic database, which can calculate the phase balance of the material system, the phase fraction and phase composition of the component phase and thermodynamic properties, to a certain extent solving the difficulty of establishing a high temperature and high pressure phase diagram in a single experiment. This paper introduces the current high temperature and high pressure phase diagram modelling method based on CALPHAD in detail, and summarizes the current problems and future research directions, laying a foundation for material design and performance evaluation under extreme conditions.

Key words: thermodynamics; CALPHAD; temperature-pressure phase diagram; molar volume

相图计算方法 (calculation of phase diagram, CALPHAD)通过建立热力学模型描述材料体系中各组成相的热力学性质,根据实验数据、第一性原理计算、统计学方法及经验半经验公式的估算数据,优化拟合模型参数,被广泛用于建立多元多相材料的热力学数据库。

体积是化学成分、温度和压强的函数。热膨胀系数是表征体积随温度变化的物理量,但热膨胀系数并不是常数。在室温下,热膨胀系数会随温度的降低而非线性地趋向于 0。而体积伴随着压强的变化则会涉及到温度、体积的变化,因此引入状态方程(equation of state) 来描述体积、压强和温度之间的关

收稿日期:2022-12-27

基金项目:16X 工程项目(HXO2022-H-09)

作者简介:王镤子愚,1999 年生,硕士生. 研究方向:热力学相图建模和计算材料学等. Email: puziyu_wang@163.com

通讯作者:高兴誉,博士、研究员. 研究方向:多尺度集成算法和软件开发、电子结构计算方法. Email: gao_xingyu@iapcm.ac.cn
种晓宇,博士、教授. 研究方向:材料多尺度集成计算、材料基因工程. Email: xiaoyuchong@kust.edu.cn

引用格式:王镤子愚,黄永兴,高兴誉,等. 基于 CALPHAD 的高温高压相图建模[J]. 铸造技术,2023,44(2): 190-194.
WANG P Z Y, HUANG Y X, GAO X Y, et al. High temperature and high pressure phase diagram modelling based on CALPHAD[J]. Foundry Technology, 2023, 44(2): 190-194.

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

系。CALPHAD 方法为了能够很好地建立复杂的多元多相体系的数据库，建立了从纯组元、二元、三元直到多元体系的模型，合理地解决了化学成分、温度、压强等外界条件与材料性质的相关性问题。CALPHAD 的同一体系建模方法使材料的物理性质和热力学数据库自然地集成为一个整体。在根据热力学数据库计算多元多相体系的相平衡，得到各组成相的相分数、有别于体系总成分的相成分、亚点阵的点阵分数以及热力学性质的同时，可以进一步计算各组成相的摩尔体积等物理性质，将其以各相相分数为加权系数进行线性加权平均，最终得到体系总的热力学数据和物理性质。根据亚点阵模型中各个亚点阵的点阵分数可以计算体系的有序度（短程有序的问题还不能完美解决），随之也能得到我们所需不同有序度的合金数据。

CALPHAD 的摩尔体积建模方法在常压下多元体系的热化学和相平衡的耦合方面已经非常成功。然而到目前为止，基于 CALPHAD 方法在高温高压下的相图建模还处于尝试阶段，但人们对建立适用于高温高压的多组分热力学数据库有着浓厚的兴趣，因为这些数据库不仅适用于地球物理学，也适用于冶金[1-4]等众多领域。目前，基于 CALPHAD 的相图建模的方法主要有 2 种：一是将亥姆霍兹能建模为温度和体积函数的方法，这与从头计算法(ab initio calculations)息息相关。这种方法虽能对相的极端温度和压强条件进行合理描述，但在多组分系统中溶液相的应用受到了极大限制[5-6]，因此本文不进一步考虑这种方法。另一种方法是将吉布斯能建模为以温度和压强为变量的体积函数的方法，本文将根据此方法进行展开描述。根据定义，吉布斯能量可以表示为以下 2 个贡献的总和：

$$\Delta G(T,p)=\Delta G(T,p_0)+\int_{p_0}^{p}V_{\mathrm{m}}(T,p)\mathrm{d}p \tag{1}$$

式中，ΔG 为相对于给定参考状态的吉布斯能量；p 为压强；p_0 为大气压；T 为温度；V_{m} 为摩尔体积。依据吉布斯能建立的模型在本质上是经验性和现象性的，但该方法已经在 CALPHAD 框架中实现了对大气压强下的复杂多组分系统的准确描述。然而人们一直在尝试进一步向更高的压强、温度范围扩展，但迄今为止只取得了有限的成功。这是因为依赖于吉布斯能量建模方法往往会导致高压下的非物理外推。例如，根据此方法建模，计算 Pt[5]、Mo[7]、W[8]、Al[9]的热力学性质，发现在高压范围内都出现了负热容的异常现象。原因可能是大气压下吉布斯能量的描述不准确或者体积的状态方程描述不准确。Brosh 等[9]对此进行了讨论，发现大气压下吉布斯能量的描述不准确而导致材料热力学性质异常的根源是 CALPHAD 方法中对 SGTE (scientific group thermo-data europe)数据进行了外推[10]。但高压下热力学性质异常的主要原因是体积状态方程的描述不准确。因此本文将介绍高温高压下依赖于 Murnaghan 状态方程的摩尔体积建模方法、依赖于 Grover 的体积与体模量的经验公式摩尔体积模型方法[11]以及 Joubert[12-13]对 Grover[11]的体积与体模量的经验公式摩尔体积模型方法的修正。

1　基于 Murnaghan 状态方程的体积模型

描述物质热力学性质的状态方程很多，但能基本描述温度、压强和体积，并能满足分离温度和压强这些先决条件的状态方程却很少，因此大多数基于 CALPHAD 方法尝试的高温高压相图计算通常都采用了 Murnaghan 状态方程[14]，其基本理念是假设等温的体模量 B 是压强的线性函数，如下式所示：

$$B(T,p)=B(T,p_0)+np \tag{2}$$

式中，$B(T,p_0)$为 1.01×10^5 Pa 下的体模量；n 为无量纲参数，通常在 4~6 之间，是一个可以优化调整的值。对式(1)进行积分变换我们可以得到以下关系：

$$V_{\mathrm{m}}(T,p)=\frac{V_{\mathrm{m}}(T,p_0)}{[1+n\kappa(T,p_0)p]^{1/n}} \tag{3}$$

式中，$V_{\mathrm{m}}(T,p)$为 1.01×10^5 Pa 下的物质的摩尔体积；$\kappa(T,p_0)$为 1.01×10^5 Pa 下的物质的等温可压缩性。根据式(3)和式(1)得到一个以温度、压强为自变量，并且分离的温度–压强热力学相图模型：

$$G(T,p)=G(T,p_0)+\frac{V(T,p_0)}{(n-1)\kappa(T,p_0)}[(1+n\kappa(T,p_0)p)^{1-1/n}-1] \tag{4}$$

式中，G 为吉布斯自由能，等式中右边的第一项 $G(T,p_0)$是大气压下的吉布斯自由能。其中应当注意的是 $G(T,p_0)$不仅仅是实验数据，在很多的计算中要将 $G(T,p_0)$外推到测量范围之外。例如在 SGTE 数据库中计算纯物质的做法。

该模型由 Fernández Guillermet[15]和 Gustafson 等[16]用于评估纯铁等纯元素的热力学描述，如图 1 所示[17]。图 1(a)为不同温度和压强下铁的相图，图 1(b)为不同摩尔体积和温度下的铁相图。

2　基于 Grover 体积与体模量的经验公式的体积模型

由于 Murnaghan 状态方程是基于体模量与压强的线性关系[14]，这导致其在高压时，例如在地球中

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

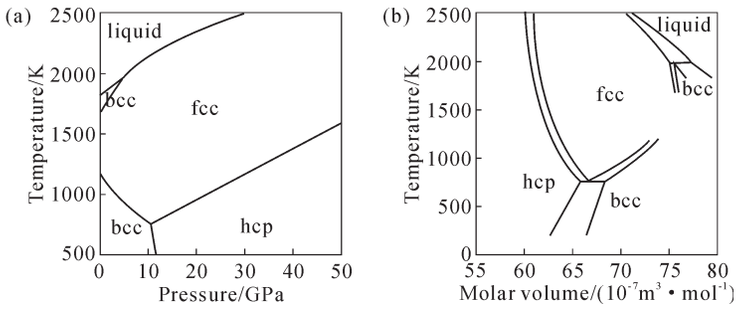

图 1 纯 Fe 相图的 2 个变体:(a) 压强–温度相图, (b) 体积–温度相图(在 (b) 中,fcc/bcc 曲线中存在间隙,原因是该处压强低于 0)[17]
Fig.1 Two variants of the pure iron phase diagram: (a) pressure-temperature phase diagram, (b) volume-temperature phase diagram (A gap in the fcc/bcc curve in (b) caused by the pressure below zero)[17]

心，利用 Murnaghan 模型描述物质的热力学性质，会产生较大的偏差。因此可以采用高阶项的高压模型,但在大多数高阶项的高压模型中体积被用作自变量。在这种情况下它不再是吉布斯能量的模型，也无法将温度与压强分离，从而完成温度–压强热力学相图模型的构造。因此 Grover 等[11]基于大量金属的冲击绝热线(雨贡纽曲线),通过计算得出的静态压缩数据和等温线发现:沿着等温线,摩尔体积与等温体积模量的对数之间存在着近乎精确的线性关系。进一步分析并提出体积与体模量的经验公式,将其作为新的压强–体积状态方程的基础:

$$V_m(T,p)=a+b\ln(B/p_{ref}) \tag{5}$$

式中,a 和 b 分别表示材料不同特性的参数且与温度相关,但与体积或压强无关;p_{ref} 是压强的参考值,仅仅为了让等式中的参数无量纲。

Jacobs 与 Oonk[18]依据上述经验公式推导出新的压强–体积状态方程,并用于拟合 MgO 在体积–压强–温度空间的实验数据。经过验证,其适用范围宽于 Murnaghan 状态方程[11,18]。

基于等式(1)和(5),Lu 等[19]又利用体模量 B 与压缩系数 κ 的热力学关系,如式(6)所示:

$$B=-\frac{V}{\frac{\partial V}{\partial p}}=\frac{1}{\kappa} \tag{6}$$

推导出了一个简单的吉布斯自由能表达式。其以材料在压强–温度–组成空间中的体积为变量,提出了一个新的可用于描述温度–压强热力学相图的模型:

$$G(T,p)=G(T,p_0)+\frac{c(T)}{\kappa(T,p_0)}\left[\exp\left(\frac{V_m(T,p_0)-V_m(T,p)}{c(T)}\right)-1\right] \tag{7}$$

式中,$c(T)$为一个与温度有关的拟合函数,可根据情况优化调整;$\kappa(T,p_0)$为 10^5 Pa 时的等温压缩系数,也与温度有关:

$$V_m(T,p_0)=V_0\exp(V_A) \tag{8}$$

$$V_A=aT+bT^2+cT^3 \tag{9}$$

式中,V_0 为在参考温度和压强为 0.1 MPa 下的摩尔体积的常数;$V_A(T)$表示体积的热膨胀。

其中:

$$V_m(T,p)=c(T)Ei^{-1}\left[Ei\left(\frac{V_m(T,p_0)}{c(T)}\right)+(p-p_0)\kappa(T,p_0)\exp\left(-\frac{V_m(T,p_0)}{c(T)}\right)\right] \tag{10}$$

式中,$Ei(z)=\int_z^{\infty}\frac{e^{-x}}{x}dx$, $Ei(z)^{-1}$ 为该积分函数的倒数。

该表达式易于模型在通用热力学软件中实现,Lu 等将该热力学模型整合到热力学计算软件 Thermo-Calc 中,并用 Fe 的实验数据[20-25]对模型进行了验证，运用其优化了纯 Fe 在 100 GPa 以下的温度–压强相图(图 2),取得了较好的效果。基于摩尔体积和压缩系数的实验数据,Huang 等[26]运用此模型对相应参数进行了优化,并计算了纯 Mg 的温度–压强相图(图 3),计算结果与 Moriarty 等[27]的理论预测以及 Olijnyk 等[28]、Nishimura[29]和 Stinton 等[30]的实验结

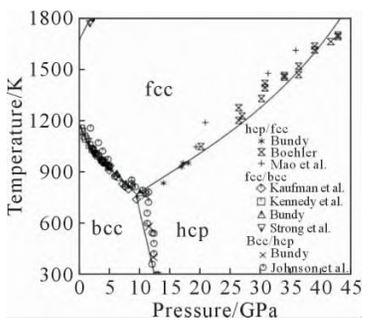

图 2 纯 Fe 的温度–压强相图[20-25]
Fig.2 Temperature-pressure phase diagram of pure iron[20-25]

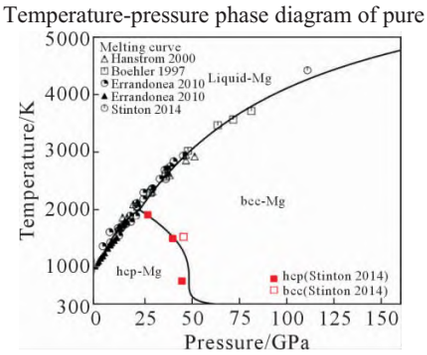

图 3 纯 Mg 的温度–压强相图[27-30]
Fig.3 Temperature-pressure phase diagram of pure magnesium[27-30]

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

果一致。

该模型已经在 Thermo-Calc 软件中实现，其运用范围宽于基于 Murnaghan 状态方程建立的模型，相对其他非吉布斯能的模型也更容易处理。Grover 模型适用于任何相，包括固相或液相，稳定或亚稳态，并且拥有 CALPHAD 方法中对多组分系统外推的特性。但该模型依然存在不足，其中最主要的问题就是在压强超过 150 GPa 时会导致热力学性质产生错误外推(负热容和负熵)。

3　Joubert 对于 Grover 模型的修正

Jacobs 和 Oonk[18]表明 Grover 模型在高压下会出现负热容的异常现象，说明模型对高温高压的预测存在局限性，其中原因可能是由于状态方程结构的错误或者是由于 CALPHAD 方法和状态方程之间存在某些不相容性。Brosh 等[9]对此进行了讨论，发现主要问题在于体积相关属性的描述不准确。例如由 Grover 模型中的参数 V_A 控制的热膨胀不依赖于压强，这直接导致了其模型在高温高压下的热膨胀出现异常。当热膨胀作为温度的函数增加时，甚至当热膨胀的二阶导数为正且很高时，直接导致了负热容的出现，致使温度–压强相图描述不准确。

Joubert 等[12]对此进行了研究，提出对 Grover模型的修正以便在高压下进行合理描述。Joubert 等表示，为了保持对低压热膨胀数据的良好描述且高压状态下使热膨胀恒定，通过使用指数项 exp $(-p/p_{cut})$ 来抑制参数 V_A 等式中的 T^2 和 T^3 项，通过在 T 项上应用类似的指数项使热膨胀在高压下降低，从而实现对 Grover 模型的修正。修正的参数 V_A 如下式：

$$V_A=aT\exp\left(-\frac{p}{p_{cut'}}\right)+bT^2\exp\left(-\frac{p}{p_{cut}}\right)+cT^3\exp\left(-\frac{p}{p_{cut}}\right) \tag{11}$$

截止压强 $p_{cut}=10^9$ Pa，第二截止压强 $p_{cut'}$通常在 10^{11} Pa 左右。

下式为热力学恒等式：

$$\left(\frac{\partial C_p}{\partial p}\right)_T=-T\left(\frac{\partial^2 V}{\partial T^2}\right)_p \tag{12}$$

通过热膨胀和可压缩性参数之间的相互关系发现，参数 V_k(式(13))对负热容的产生也有贡献。因此，在相同的指数项下，也要衰减其对温度的依赖性。修正如下：

$$V_k=a+bT\exp\left(-\frac{p}{p_{cut}}\right)+cT^2\exp\left(-\frac{p}{p_{cut}}\right)+dT^3\exp\left(-\frac{p}{p_{cut}}\right) \tag{13}$$

通过对 Grover 模型的修正，Joubert 等将其运用于 Pt 的热力学性质评价，发现负热容的异常现象已经不存在。这种修正方法也适用于 Os-Pt 二元系统的描述[13]。该模型在准确性、可预测性和可用性之间进行了权衡，与许多其他模型相比，也较容易处理，因此其可以成为 CALPHAD 方法中的实用工具，特别是在多组分系统的评估框架中用于开发完整且有用的数据库。但是，修正后的 Grover 模型在计算高压下的热力学性质时依然有不合理之处，如高压下温度的热膨胀函数的斜率下降没有得到很好的控制。在 50 GPa 时，温度的热膨胀函数的斜率应是存在的，但在模型中却是恒定的，这可能对热容造成影响；以及在非常高的压强下 C_P 应向 C_V 收敛，但在改进的 Grover 模型中，压强非常高的情况下，C_P 是向 SGTE 数据库中大气压下的值收敛，这与实际情况不一致。此外，在压强为 1 GPa 附近观察到了 C_P 的最小值，这也是异常现象。

4　结论

(1)针对某些材料体系，这些模型的准确性已经被实验验证，但在极高温(≥6 000 K)、极高压(≥150 GPa)下模型的误差逐渐增大。

(2)讨论了简单的 Murnaghan 状态方程用于温度–压强相图的摩尔体积建模，但由于其假设体模量和压强为线性关系，造成其在高温高压下的应用是具有局限性的。

(3)Grover 模型是通过实验推导出摩尔体积与等温体模量的对数之间存在精确的线性关系建立的，基于该模型建立的 150 GPa 下的相图已被实验数据所验证，但该模型对极高压下热膨胀的描述出现负值，造成该模型仅适用于不超过 150 GPa 压强的条件。Joubert 模型是对 Grover 模型的修正，即通过引入压强截止项的数学表达式来改进对热膨胀的描述，该模型已成功应用于描述多种金属在 200 GPa 以下的热力学性质。但是，在高于 2 倍标准体模量的压强下，以及高于 2 倍常压熔点的温度下，基于CALPHAD 方法的建模更具有科学意义与应用价值。

(4)下一步将通过对体积–温度–压强关系的描述进一步修正，通过尝试运用不同的状态方程以及建模方法，从而提高模型在极高温(≥6 000 K)、极高压(≥150 GPa)下的预测能力，为极端条件下材料设计和性能评估奠定基础。

参考文献：

[1] BARTKOWSKA A, BAZARNIK P, HUANG Y, et al. Using high-pressure torsion to fabricate an Al-Ti hybrid system with exceptional mechanical properties [J]. Materials Science and Engineering: A, 2021, 799: 140114.

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

[2] GU T, LI J W, XU F Q, et al. Effect of high temperature-high pressure treatment on microstructure and mechanical properties of Cu-Cr alloy[J]. Materials Research Express, 2020, 7(2): 026505.

[3] JIE J C, ZOU C M, BROSH E, et al. Microstructure and mechanical properties of an Al-Mg alloy solidified under high pressures[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2013, 578: 394-404.

[4] KAWASAKI M, AHN B, LEE H, et al. Using high-pressure torsion to process an aluminum-magnesium nanocomposite through diffusion bonding [J]. Journal of Materials Research, 2016, 31(1): 88-99.

[5] HAMMERSCHMIDT T, ABRIKOSOV I A, ALFÈ D, et al. Including the effects of pressure and stress in thermodynamic functions [J]. Physica Status Solidi (b), 2014, 251(1): 81-96.

[6] LU X G, CHEN Q. A CALPHAD Helmholtz energy approach to calculate thermodynamic and thermophysical properties of fcc Cu [J]. Philosophical Magazine, 2009, 89(25): 2167-2194.

[7] FERNÁNDEZ GUILLERMET A. Critical evaluation of the thermodynamic properties of molybdenum [J]. International Journal of Thermophysics, 1985, 6(4): 367-393.

[8] KARBASI A, SAXENA S K, HRUBIAK R. The thermodynamics of several elements at high pressure[J]. Calphad, 2011, 35(1): 72-81.

[9] BROSH E, MAKOV G, SHNECK R Z. Application of CALPHAD to high pressures[J]. Calphad, 2007, 31(2): 173-185.

[10] ANDERSSON J O, FERNÁNDEZ GUILLERMET A, GUSTAFSON P, et al. A new method of describing lattice stabilities[J]. Calphad, 1987, 11(1): 93-98.

[11] GROVER R, GETTING I C, KENNEDY G C. Simple compressibility relation for solids[J]. Physical Review B, 1973, 7: 567-571.

[12] JOUBERT J M, CRIVELLO J C, DEFFRENNES G. Modification of Lu's (2005) high pressure model for improved high pressure/high temperature extrapolations. Part I: Modeling of platinum at high pressure/high temperature[J]. Calphad, 2021, 74: 102304.

[13] JOUBERT J M, CRIVELLO J C, YUSENKO K V. Modification of Lu's (2005) high pressure model for improved high pressure/high temperature extrapolations. Part II: Modeling of osmium-platinum system at high pressure/high temperature [J]. Calphad, 2021, 74: 102311.

[14] MURNAGHAN F D. The Compressibility of media under extreme pressures [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 1944, 30(9): 244-247.

[15] FERNÁNDEZ GUILLERMET A, GUSTAFSON P, HILLERT M. The representation of thermodynamic properties at high pressures [J]. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 1985, 46 (12): 1427-1429.

[16] GUSTAFSON P. An evaluation of the thermodynamic properties and the *P*, *T* phase diagram of carbon [J]. Carbon, 1986, 24 (2): 169-176.

[17] LUKAS H L, FRIES S G, SUNDMAN B. Computational thermodynamics: The Calphad method [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2007.

[18] JACOBS M H G, OONK H A J. A realistic equation of state for solids. The high pressure and high temperature thermodynamic properties of MGO[J]. Calphad, 2000, 24(2): 133-147.

[19] LU X G, SELLEBY M, SUNDMAN B. Implementation of a new model for pressure dependence of condensed phases in Thermo-Calc[J]. Calphad, 2005, 29(1): 49-55.

[20] BUNDY F P. Pressure-temperature phase diagram of iron to 200 kbar, 900 ℃ [J]. Journal of Applied Physics, 1965, 36(2): 616-620.

[21] HAZEN R M. High-pressure research in mineral physics [J]. Eos, Transactions American Geophysical Union, 1988, 69: 875.

[22] JAYARAMAN A, KLEMENT W, NEWTON R C, et al. Fusion curves and polymorphic transitions of the group III elements-Aluminum, gallium, indium and thallium-At high pressures[J]. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 1963, 24(1): 7-18.

[23] JOHNSON P C, STEIN B A, DAVIS R S. Temperature dependence of shock-induced phase transformations in iron [J]. Journal of Applied Physics, 1962, 33(2): 557-561.

[24] KAUFMAN L, CLOUGHERTY E V, WEISS R J. The lattice stability of metals—III. Iron[J]. Acta Metallurgica, 1963, 11(5): 323-335.

[25] STRONG H M, TUFT R E, HANNEMAN R E. The iron fusion curve and γ-δ-l triple point[J]. Metallurgical Transactions, 1973, 4 (11): 2657-2661.

[26] HUANG D D, LIU S H, DU Y, et al. Modeling of the molar volume of the solution phases in the Al-Cu-Mg system [J]. Calphad, 2015, 51: 261-271.

[27] MORIARTY J A, ALTHOFF J D. First-principles temperature-pressure phase diagram of magnesium [J]. Physical Review B, 1995, 51(9): 5609-5616.

[28] OLIJNYK H, HOLZAPFEL W B. High-pressure structural phase transition in Mg[J]. Physical Review B, 1985, 31(7): 4682-4683.

[29] NISHIMURA N, KINOSHITA K, AKAHAMA Y, et al. Volume compression of Mg and Al to multimegabar pressure: Proceedings of the 20th AIRAPT International Conference[C]. Karlsruhe: Mineralogical Society of America, 2005: 278.

[30] STINTON G W, MACLEOD S G, CYNN H, et al. Equation of state and high-pressure/high-temperature phase diagram of magnesium[J]. Physical Review B, 2014, 90(13): 134105.

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net