

# Cassini-Huygens

MISSION TO SATURN & TITAN

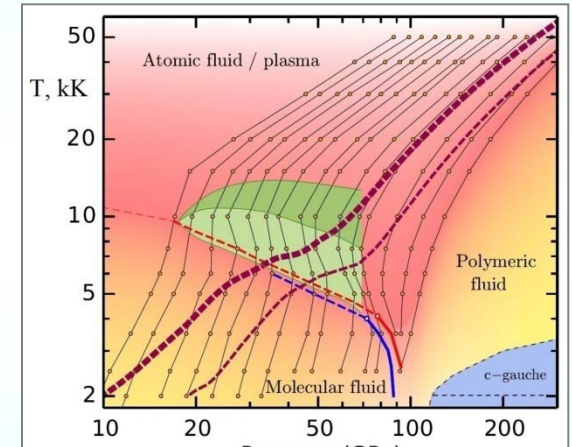
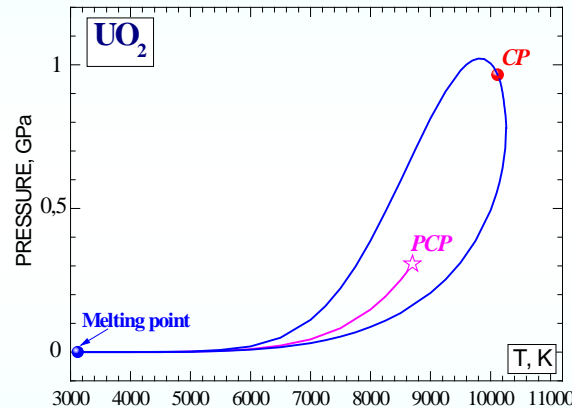
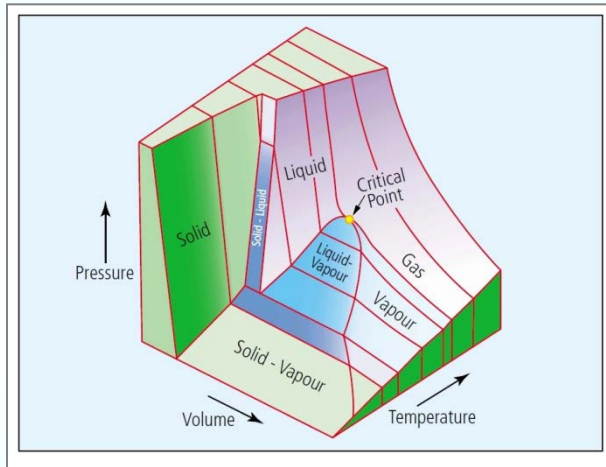
Giant planets evolution problem



“Elbrus-COVID”

March 2021

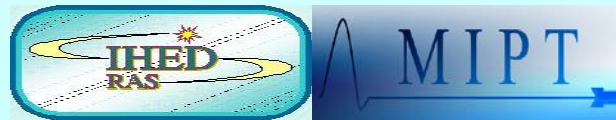
## Problem of Phase Transitions in High Energy Density Matter



**Igor Iosilevskiy**

Collaboration: Victor Gryaznov

Joint Institute for High Temperature (RAS)  
Institute of Problem of Chemical Physics (RAS)  
Moscow Institute of Physics and Technology



# Фазовые переходы в неидеальной плазме

## Содержание

**2020 – 2021 – Драматический Год !**

**Проблема фазовых границ и критической точки Урана**

**Проблема неконгруэнтных фазовых переходов**

**Заключение**

“The Man of Extreme”

**Vladimir Fortov**



23.01.1946

....

....

....

29.11.2020

**Зима 1978 – Гостиница Чегет**

**Первое Совещание – “Уравнение Состояния Вещества”  
выделилось из**

***Школы по Моделям Механики Сплошной Среды Н.Н.Яненко***

**Организаторы:**

***Анатолий Индербиевич Темроков  
Григорий Васильевич Гадияк***

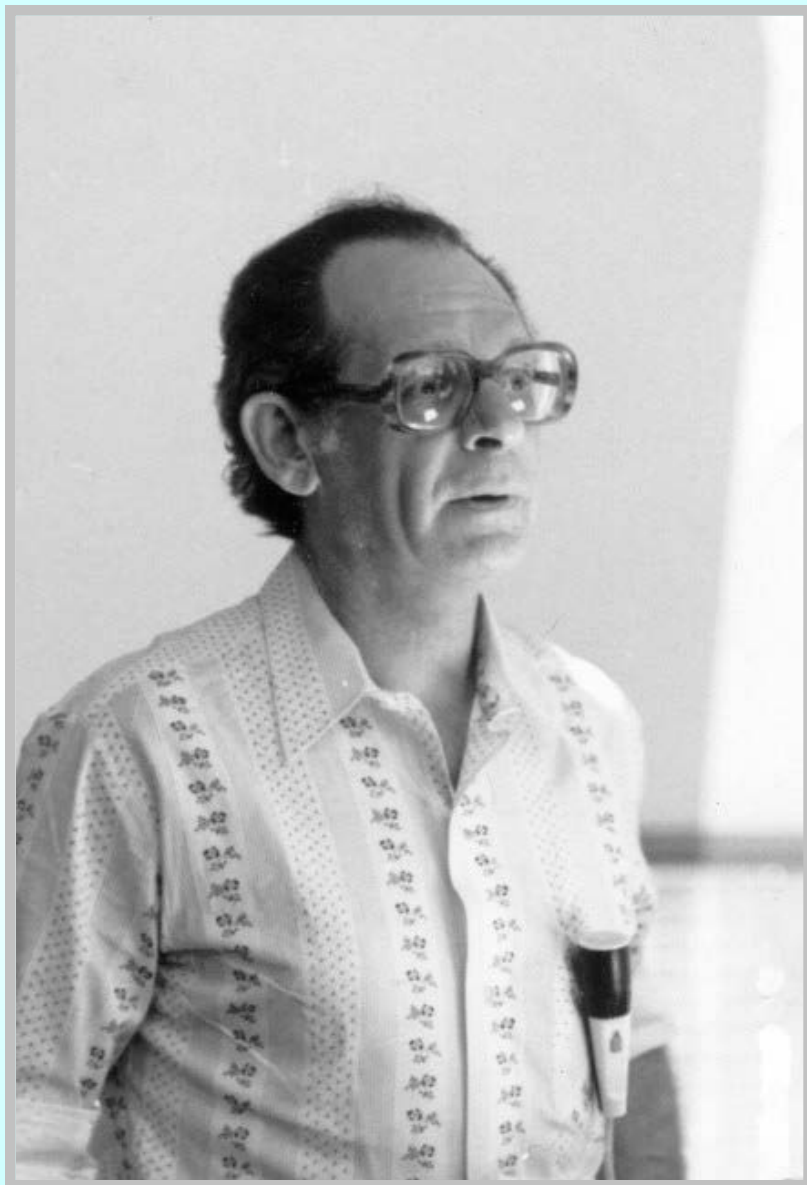
**Среди участников:**

**Давид Абрамович Киржниц  
Николай Николаевич Калиткин  
Владимир Евгеньевич Фортов  
Алексей Владимирович Бушман**

**Галина Васильевна Шпатаковская  
Виктор Грязнов  
Игорь Иосилевский**

**.....**

Давид Абрамович Киржниц

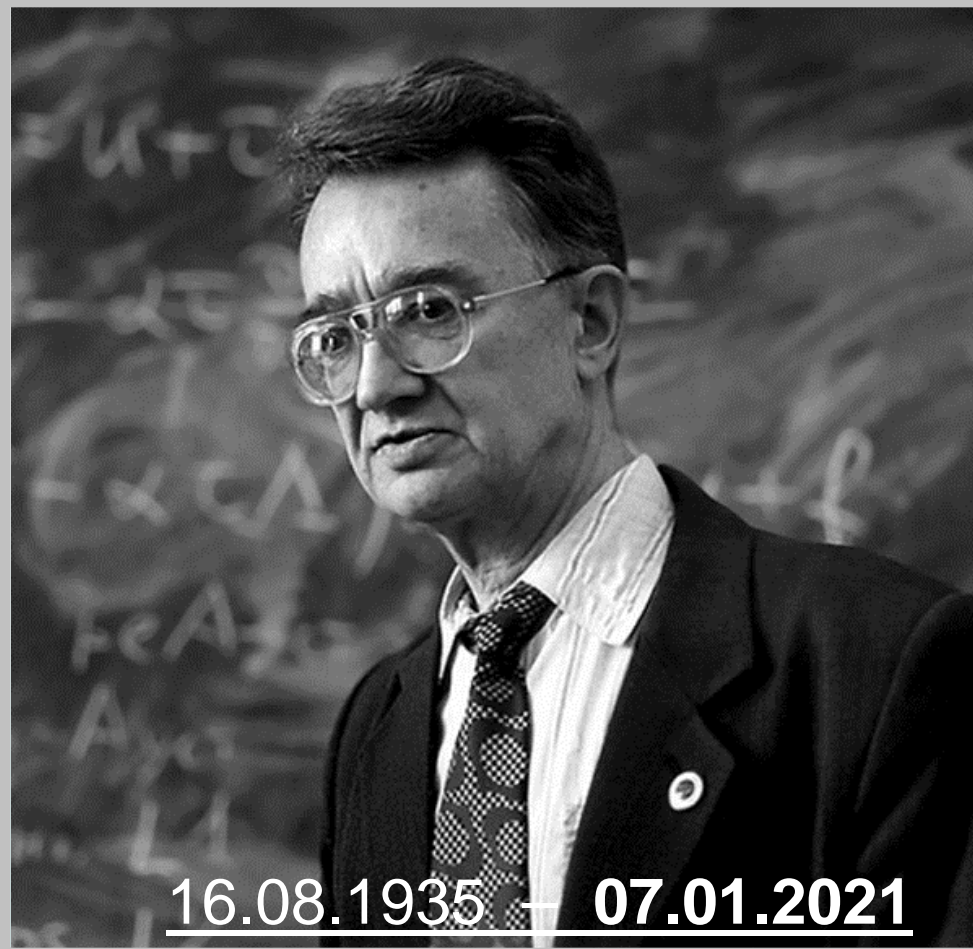


13.10.1926 – 04.05.1998

В 1978 году открыл наше Совещание лекцией “Термодинамика Черных Дыр”

Николай Николаевич Калиткин

Рыцарь Ордена “Томаса – Ферми”  
(с квантовыми и обменными поправками)



16.08.1935 – 07.01.2021



**2020 - 2021 – Наши потери...**

**Геннадий Исаакович Канель**



**30.06.1944 – 31.01.2021**

# Исследования проблемы **Фазовых Переходов** **в Веществе Экстремальных Параметров**

Были в значительной мере инициированы  
Владимиром Евгеньевичем Фортовым

## Вехи

Отчет (1973) Альтшулер Л.В., Фортон В.Е. и др  
– Оценка Параметров Крит-точки Урана

ТВТ (1975) - Фортон В.Е. Леонтьев А.А., Дремин А.Н  
– Оценка Параметров Крит-точки Б-ва Металлов

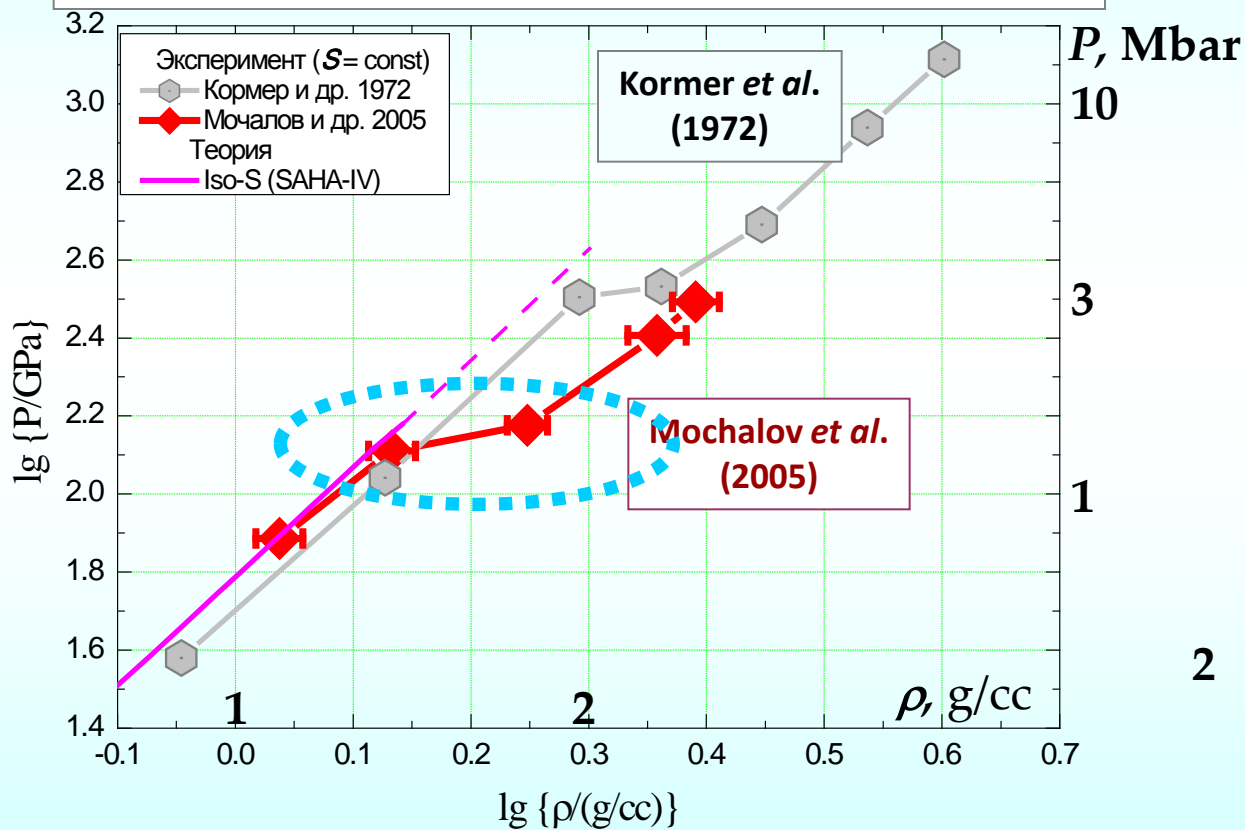
PRL (2007) – Fortov V.E. Ilkaev R.I.,  
– Quasi-isentropic compression of deuterium plasmas

ЖЭТФ (2010-2021) – Мочалов М.А. Фортон В.Е. и др  
– Квазиизэнтропическое сжатие плазмы дейтерия  
до давлений 18 Мбар,...55 Мбар,... 185 Мбар...



# Quasi-isentropic compression of liquid hydrogen up to the pressure 10 Mbar /1970 – 2007 /

Density jump at quasi-isentropic compression



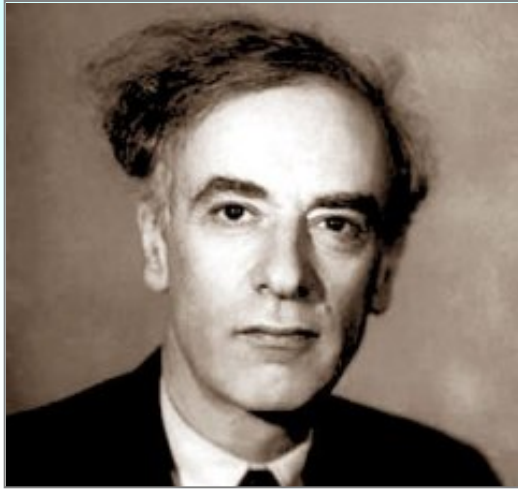
After:  
M. Mochalov *et al.*  
SCCS-2005,  
Moscow

Fortov V., Ilkaev R., Arinin V., Burtzev V., Golubev V., Iosilevskiy I., Khrustalev V., Mikhailov A., Mochalov M., Ternovoi V., Zhernokletov. M.

*Phys. Rev. Lett.* **99**, 2007



# Hypothesis *about* 1<sup>st</sup> order phase transition “insulator-conductor” *in* metals



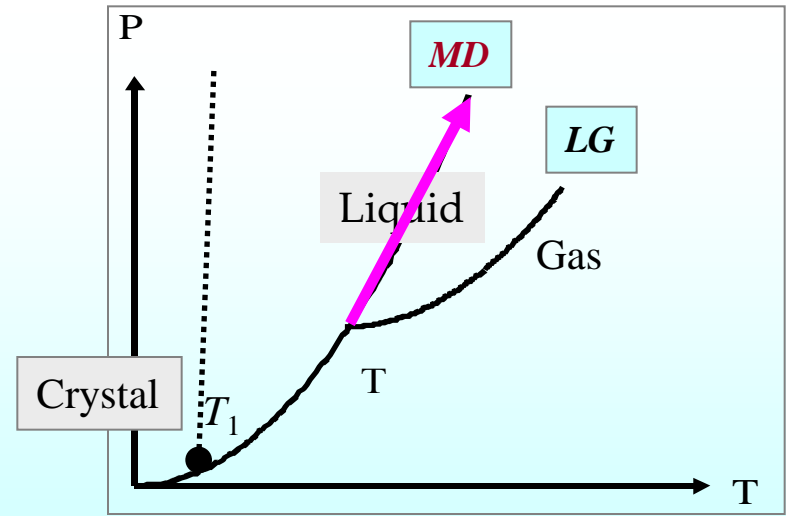
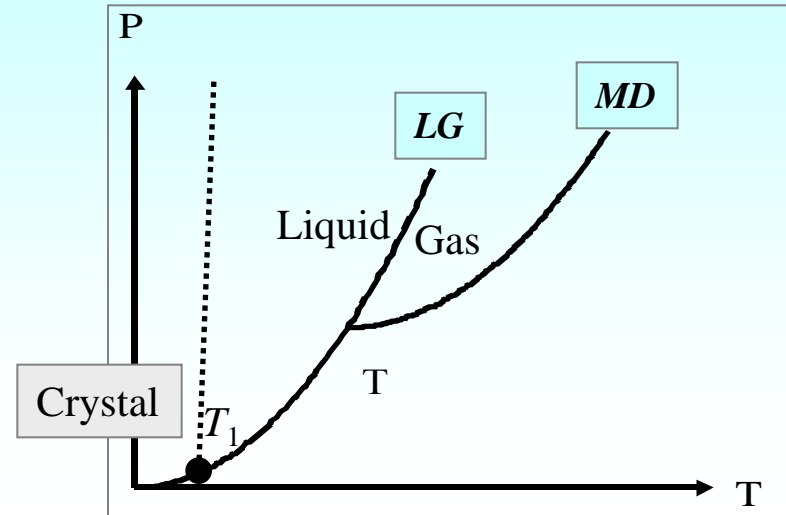
Lev Landau

(1943)



Yakov Zeldovich

~80 years



Landau L.D., Zeldovich Ya.B., *Acta Physico-Chimica URSS*, 18, (1943)  
*On the relation between the liquid and the gaseous states of metals*

# Теория "плазменных" фазовых переходов

*(Coulomb attraction + quantum repulsion)*

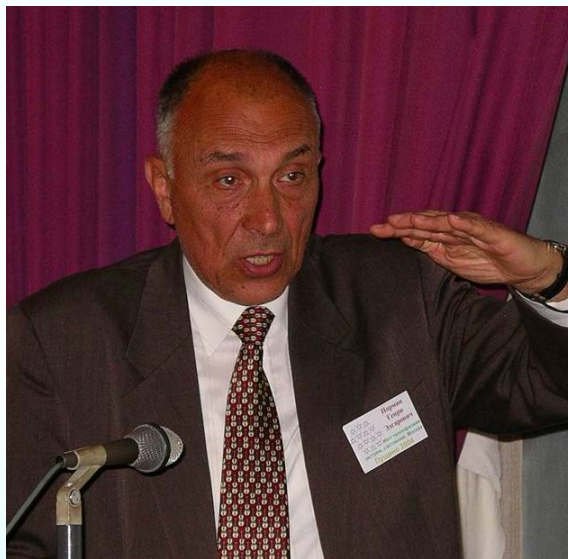
(1968 - 1970)



Андрей Старостин

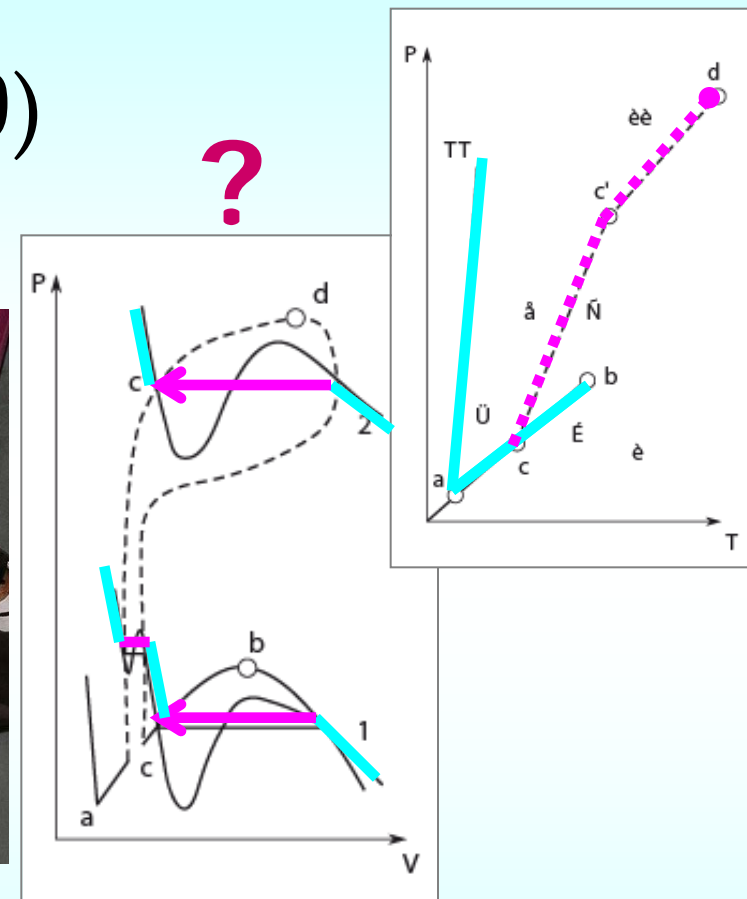
16 апреля 2020

~ 50 лет



Генри Норман

Норман Г.Э., Старостин А.Н. *ТВТ*, 6, 410 (1968)  
*Плазменный фазовый переход*



See also: Ebeling W., Kraeft W.D., Kremp D. *Theory of Bound States and Ionization Equilibrium in Plasmas and Solids* (Akademic-Verlag, Berlin, 1976 / МИР, Москва, 1979)

# Critical Point Parameters

*Theoretical estimations of V. Fortov et al. (1975)*

Элемент	$T_c, K$	$\rho_c, 10^8 Pa$	$\rho_c, g\cdot cm^{-3}$	$S_c, cal\cdot mol^{-1}\cdot K^{-1}$
Zr	16250	7,52	1,79	40,45
Zn	3196	2,63	2,29	31,27
Y	10800	3,74	1,30	38,92
Yb	4280	1,38	2,36	36,92
Y	12300	10,78	1,86	37,26
U	11630	6,11	5,30	43,07
W	21010	15,83	5,87	43,34
Ti	11790	7,63	1,31	37,92
Sn	8200	3,35	2,05	39,44
Th	14950	4,88	3,21	43,67
Tu	5910	2,65	3,22	38,52
Tl	4470	1,63	3,16	38,67
Tb	8060	3,08	2,57	42,34
Tb	1850	0,75	2,21	35,22
Ta	20570	13,5	5,04	43,07
Sr	3860	0,90	0,86	35,23
Ag	7010	4,50	2,93	36,86
Se	8350	4,08	0,93	36,82
Sm	5340	2,10	2,51	40,62
Ru	15500	13,74	3,79	37,14
Rh	13510	11,23	3,62	39,66
Re	19600	15,7	6,32	43,42
Ra	3830	0,77	1,93	38,32
Pr	9160	2,85	1,86	41,39
Tc	15930	11,81	3,09	41,00
Pa	12650	4,82	3,72	43,34
Po	2050	0,62	2,67	37,52
Pt	14330	8,70	5,02	41,8
Pd	10760	7,64	3,20	36,64
Os	17110	14,49	6,83	42,60
Nb	19040	12,52	2,59	41,65
Ni	10330	9,12	2,19	36,50
Nd	7920	2,65	2,05	41,33
Mo	16140	12,63	3,18	41,21
Lu	7060	2,84	2,97	39,41
Fr	1810	0,12	0,65	39,50

Элемент	$T_c, K$	$\rho_c, 10^8 Pa$	$\rho_c, g\cdot cm^{-3}$	$S_c, cal\cdot mol^{-1}\cdot K^{-1}$
Bi	4200	1,26	2,66	40,2
Hg	1763 ± 15	1,51 ± 0,025	4,2 ± 0,4	33,790
Hg	1753 ± 10	1,52 ± 0,01	5,7 ± 0,2	33,241
Na	2573	0,275	0,206	31,683
K	2223	0,152	0,194	33,931
Rb	2093	0,159	0,346	36,485
Cs	2057 ± 40	0,144	0,428 ± 0,012	38,111
Li	3223	0,689	0,105	27,666
Mn	5940	6,28	2,46	35,68
Mg	3590	1,98	0,56	29,48
Pb	4980	1,84	3,25	39,81
La	11060	3,35	1,78	40,58
Fe	9600	8,25	2,03	37,20
Ir	15380	12,78	6,77	41,91
In	6120	2,43	1,84	37,95
Ho	7240	2,94	2,84	40,63
Hf	18270	9,38	3,88	42,59
Au	8970	6,10	5,68	39,40
Ge	9170	4,90	1,64	37,77
Ga	7210	4,31	1,77	35,91
Gd	8670	3,25	2,50	42,79
Er	8250	3,34	2,86	40,51
Eu	4680	1,21	1,67	41,36
Dy	7240	2,91	2,76	41,05
Cu	8390	7,46	2,39	35,30
Co	10460	9,23	2,20	37,12
Cr	9620	9,68	2,22	37,35
Ce	8860	3,03	2,03	40,51
Ca	4180	1,21	0,49	32,70
Cd	2790	1,60	2,74	33,20
Be	8080	11,70	0,55	27,02
Ba	4100	0,81	1,15	37,06
Al	8000	4,47	0,64	33,58
Sb	2570	1,30	2,61	
B	8200	9,57	0,69	
Se	1010	0,37	1,60	
S	730	0,30	0,72	



~ 45 years

Fortov V.E., Dryemin A.N., Leontev A.A. *High Temperature* 13 (1975)

**Один из главных источников мотивации исследований проблемы неидеальной плазмы**

(1950-1980)

**Разработка газофазного ядерного ракетного двигателя для пилотируемого полете на Марс**



# Разработка газофазного ядерного реактора для пилотируемого полете на Марс

(1950-1980)

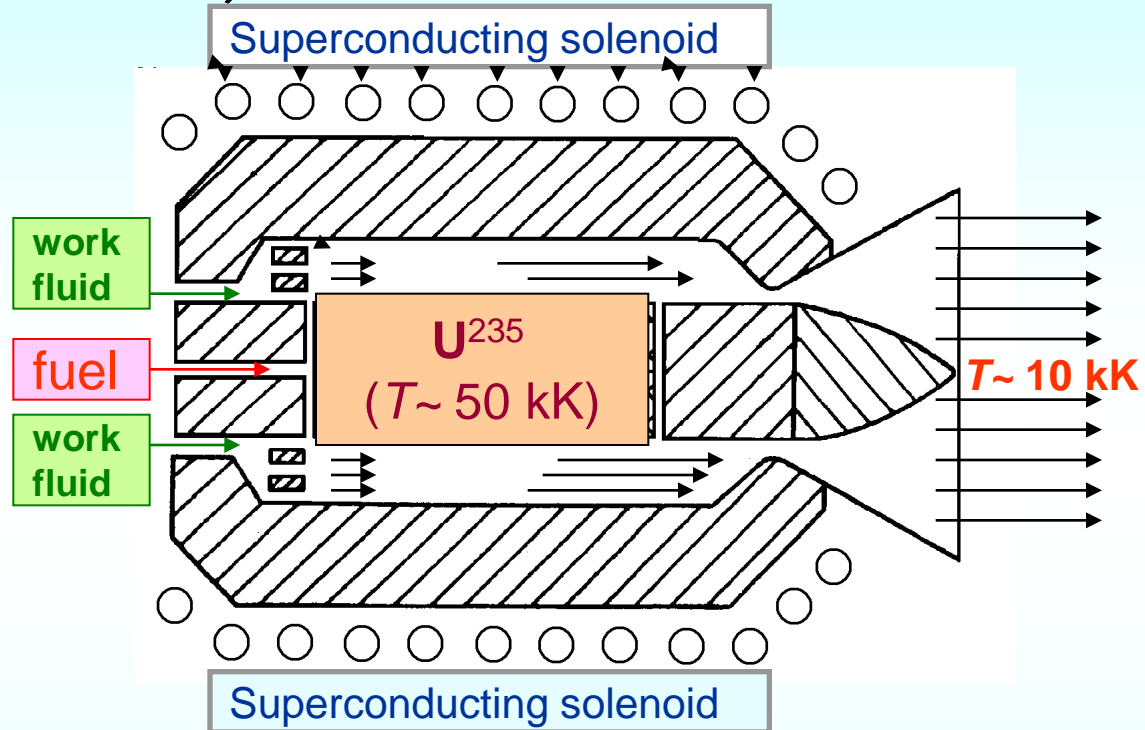


**Иевлев**

**Виталий Михайлович**

(1926 - 1990)

Чл-корр АН СССР



**Высокотемпературный проект ГФЯР**

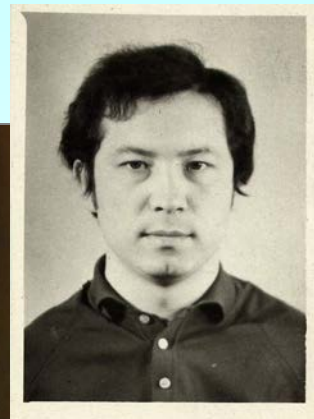
**В.М. Иевлев – Известия АН СССР, № 6, 24 (1977)**

Gryaznov V, Iosilevskiy I, Krasnikov Yu, Kuznetsova N, Kucherenko V, Lappo G, Lomakin B, Pavlov G, Fortov V, Son E, *Thermophysics of Gas-Core Nuclear Reactor* / Ed. V. Ievlev (1980), *Rocket engines and energy converters based on Gas-Core Nuclear Reactor* // Moscow, 2002, (in Russian)

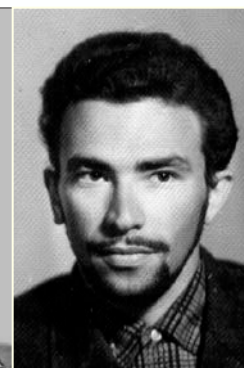
Владимир Е. Фортов



Эдуард Е. Сон



29 ноября 2020



Виктор Грязнов

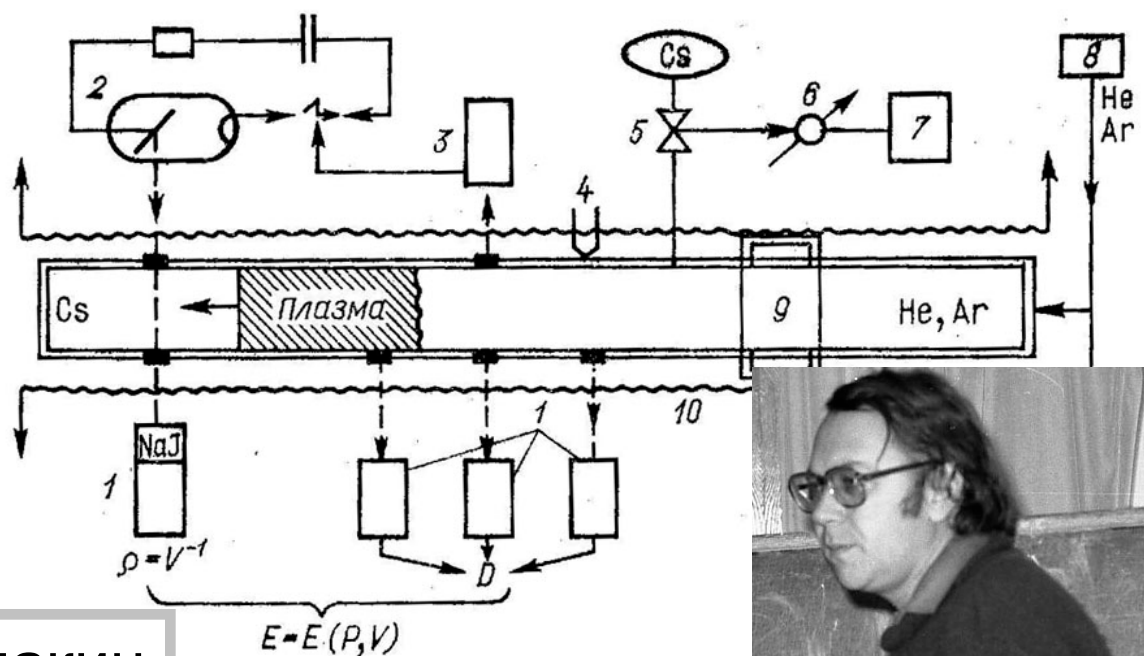
Игорь Иосилевский

Евгений Нестеров

# Исследование неидеальной плазмы на цезиевой подогреваемой ударной трубе



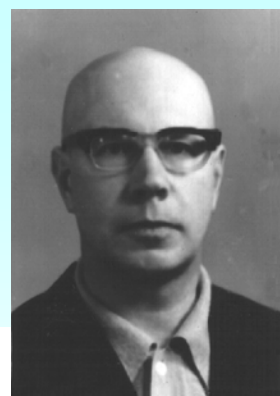
**“Поймать” плазменный фазовый переход**  
*(... в Большом Каноническом Ансамбле)*



**Борис Николаевич Ломакин**  
*Старший товарищ*  
*и учитель главному*  
*в жизни...*

ма подогреваемой ударной трубы:  
 одным повторителем; 2 — рентгеновская труба;  
 — термопары; 5 — кран; 6 — вакуумметр; 7 —  
 — нны; 10 — обмотка обогревателя





Иевлев В.М.

# **НВ!! - Теплофизические Свойства**

*Термодинамика, перенос, оптика ...*

Смеси:

**U + H + Li + K + Na + ...**

Давления:

$P \sim 1 \leftrightarrow 1000$  бар

Температуры:

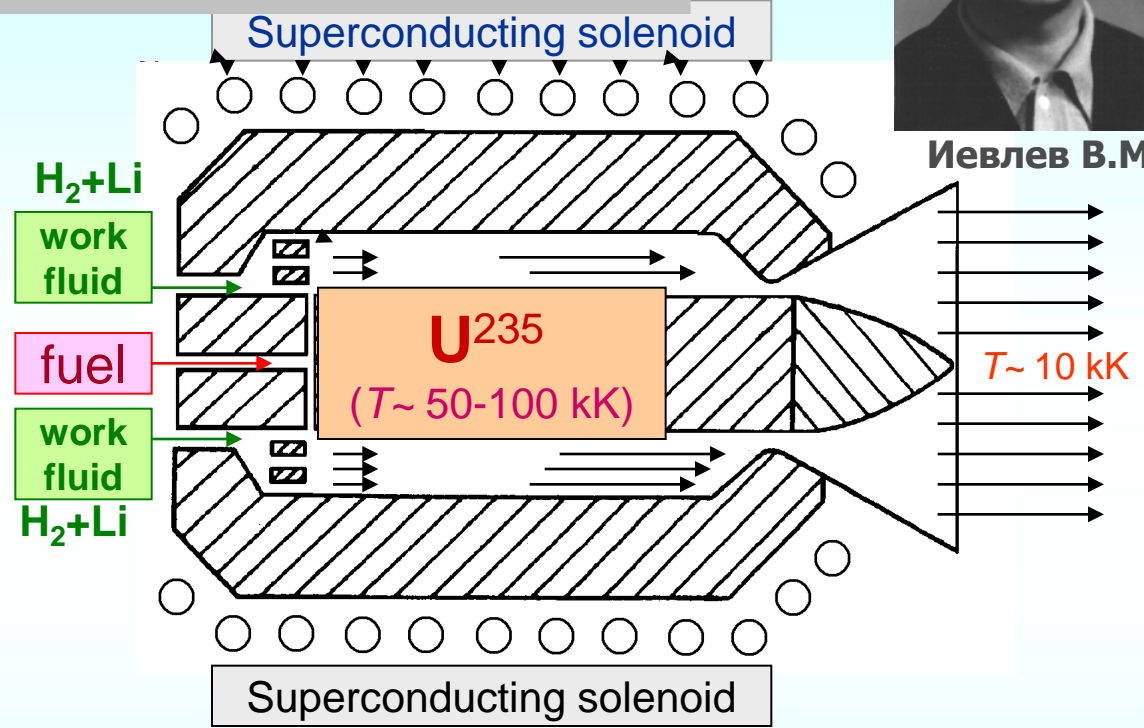
$T \sim 1 \leftrightarrow 100$  кК

## **Фазовые переходы = !!**

- (1) “Обычные” –  
- типа “Газ-жидкость”
- (2) - Гипотетические  
“Плазменные”,  
“Диссоциативные” и др  
– **??**

**Прежде всего в Уране**

**!!**



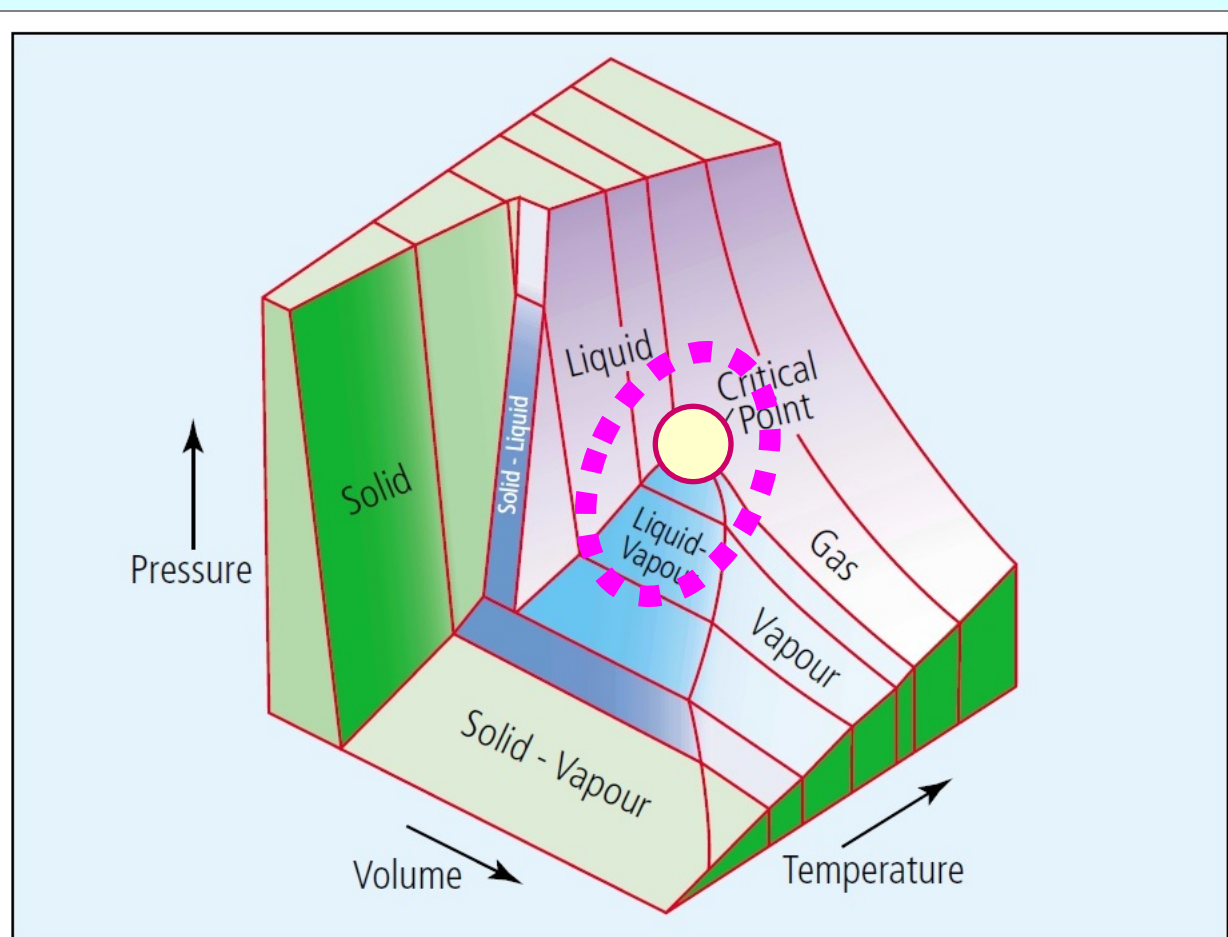
**Высокотемпературный вариант ГФЯР**

Иевлев В.М. *Известия АН СССР (Энергетика)* (1977)

В.Грязнов, И.Иосилевский, Э.Сон, В.Фортов, и др.  
“Теплофизика газофазного ядерного реактора” (1980)



# Во многих приложениях нам надо знать свойства высокотемпературной зоны фазовой границы



Discovery • The Science & Technology Journal

**Figure 1:** The three-dimensional pressure-temperature phase diagram for a simple material. The  $P(V,T)$  surface shown describes all possible states attainable for the material in question.

# Critical Point Parameters

Theoretical estimations of V. Fortov et al. (1975)

$$T_{crit}(U) \approx 11630 \text{ K} !$$

$$P_{crit}(U) \approx 6 \text{ кбар}$$

$$T_{crit}(W) \approx 21'000 \text{ K} !$$

$$T_{crit}(Ta) \approx 20'600 \text{ K} !$$

$$T_{crit}(Re) \approx 19600 \text{ K} !$$

$$T_{crit}(Nb) \approx 19000 \text{ K} !$$



	Т, К	α, моль <sup>-1</sup> К	β, моль <sup>-1</sup> К	γ, моль <sup>-1</sup> К
Yb	4280	1,38	2,36	36,92
Y	12300	10,78	1,86	37,26
U	11630	6,11	5,30	43,07
W	21010	15,83	5,87	43,34
Ta	20600	13,5	5,04	43,0
Re	19600	15,7	6,32	43,4
Nb	19040	12,52	2,59	41,6
Ni	10330	9,12	2,19	36,50

	Т, К	α, моль <sup>-1</sup> К	β, моль <sup>-1</sup> К	γ, моль <sup>-1</sup> К
Na	2573	0,275	0,206	31,683
K	2223	0,152	0,194	33,931
Rb	2093	0,159	0,346	36,485
Cs	2057 ± 40	0,144	0,428 ± 0,012	38,111
Li	3223	0,689	0,105	27,666
Mn	5940	6,28	2,46	35,68
Mg	3590	1,98	0,56	29,48
Pb	4980	1,84	3,25	39,81
La	11060	3,35	1,78	40,58
Fe	9600	8,25	2,03	37,20
Ir	15380	12,78	6,77	41,91

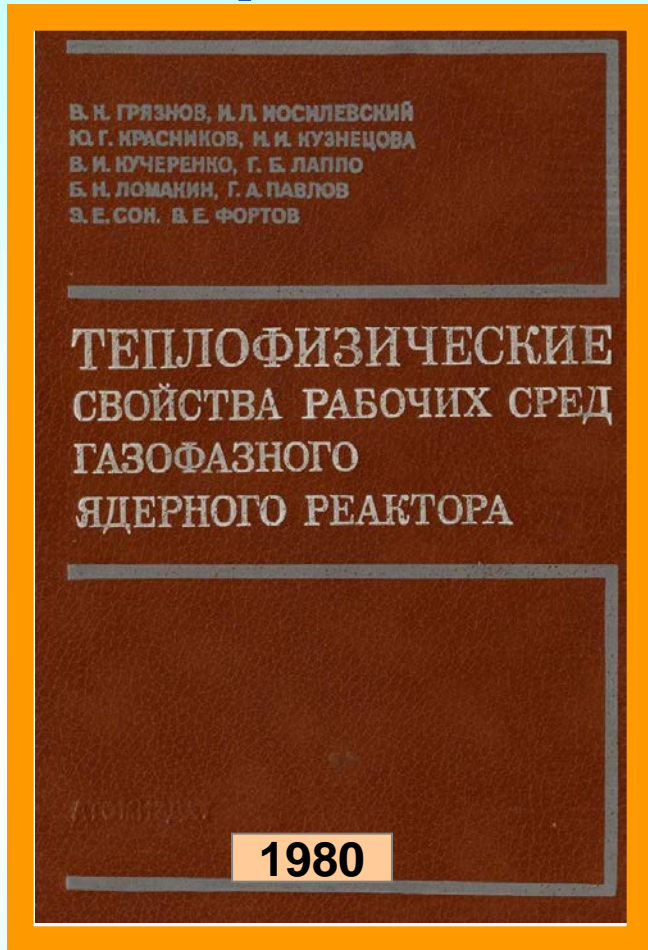
Полуэмпирический критерий подобия  
(Kopp – Lang – Gross)  
Корреляция критической температуры  
и главной калорической характеристики  
вещества - Теплоты Испарения

$$kT_C \approx \Delta H_s \cdot const$$

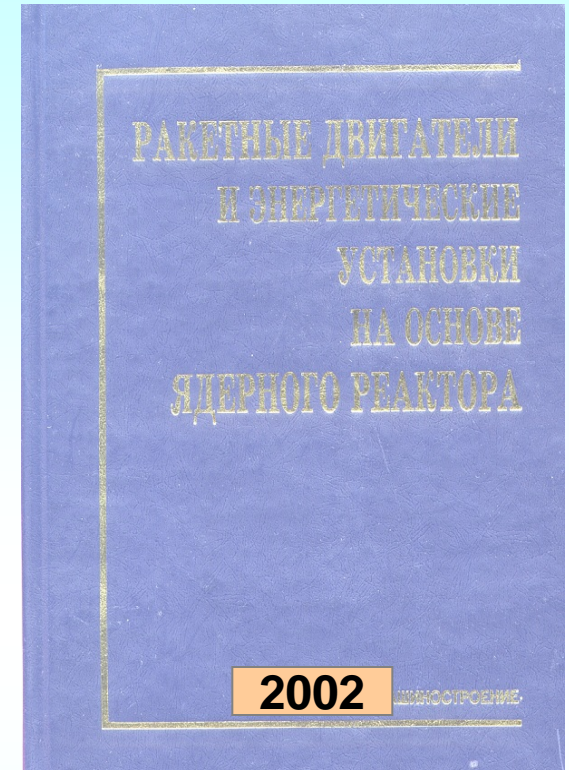
Al	8000	4,47	0,64	33,52
Sb	2570	1,30	2,61	36,1
B	8200	9,57	0,69	28,9
Se	1010	0,37	1,60	31,8
S	730	0,30	0,72	27,7



# Теплофизика Газофазного Ядерного Реактора



Ядерные ракетные  
двигатели  
Москва, 2001



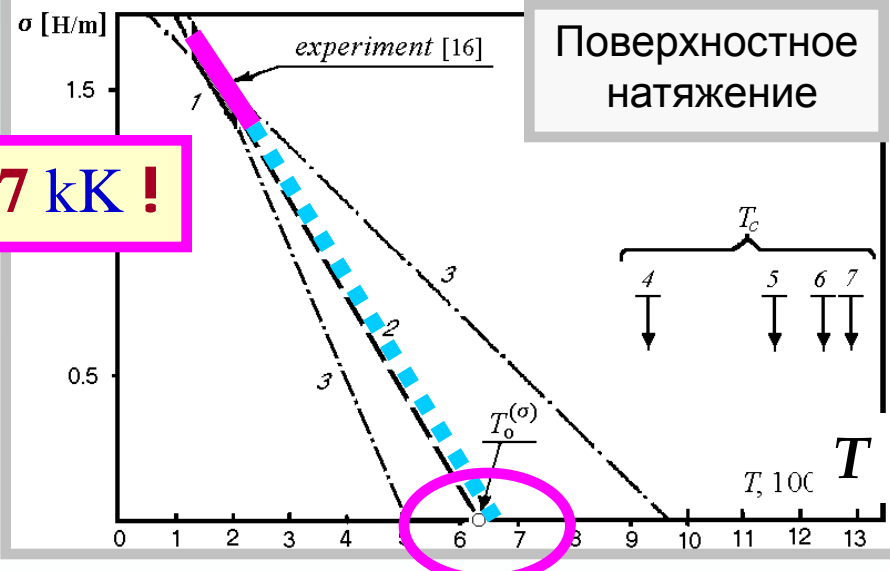
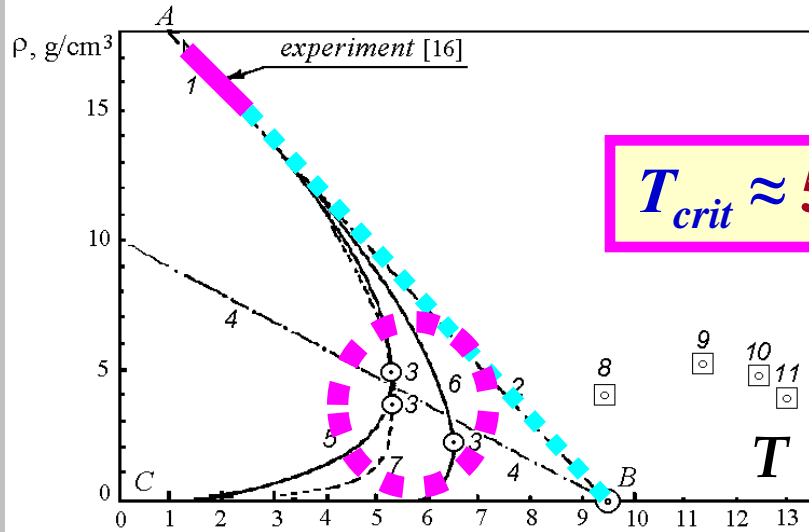
Ракетные двигатели и  
энергоустановки с  
газофазным ядерным  
реактором (2002)

Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Красников Ю.Г., Кузнецова Н.И., Кучеренко В.И., Лаппо Г.Б., Ломакин Б.Н., Павлов Г.А., Сон Э.Е., Фортон В.Е. *Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора* // Ред. В.М.Иевлев (Москва: 1980)

*“Ракетные двигатели и энергоустановки на основе газо-фазного ядерного реактора”*, ред. А.С.Коротеев, Москва, (2002)

**Статический эксперимент !**

**Точность - 0.7 % !**



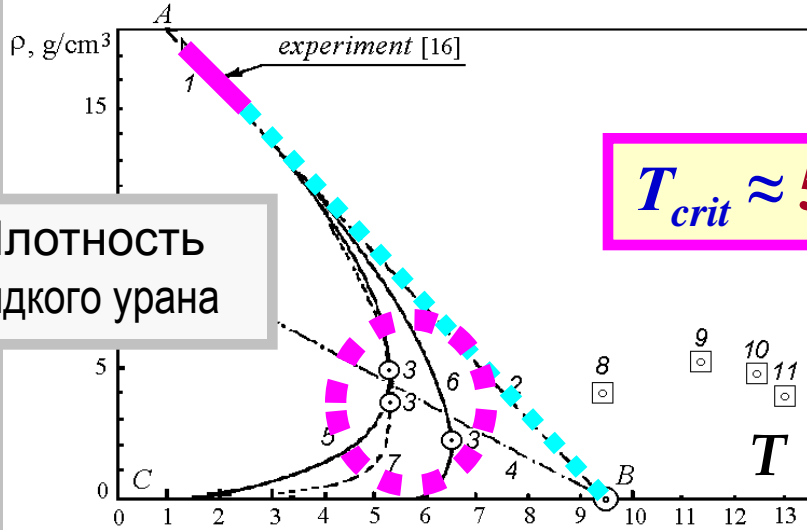
**Плотность жидкого урана  
(1400 – 2100 К) !**

**Поверхностное натяжение  
жидкого урана (1400 – 2100 К) !**



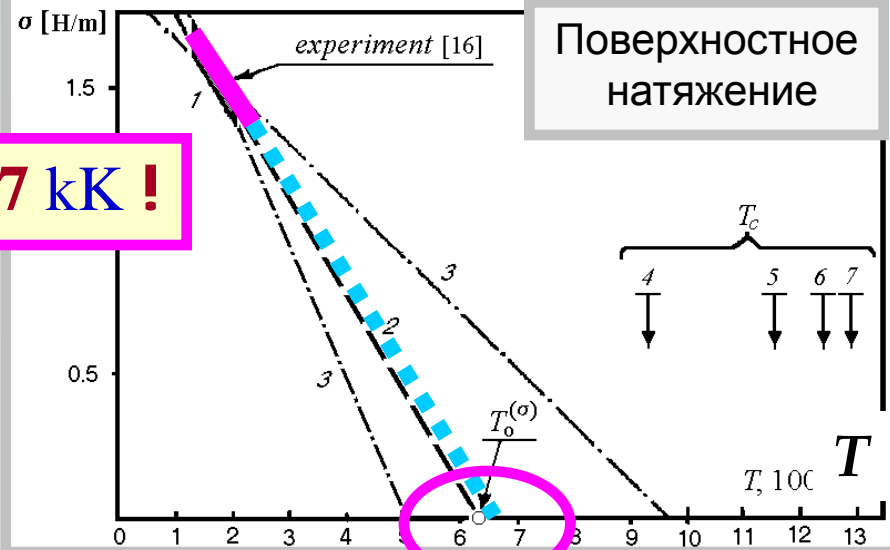
**Статический эксперимент !**

**Точность - 0.7 % !**



Плотность жидкого урана

**$T_{crit} \approx 5-7 \text{ kK} !$**



Поверхностное натяжение

**“ЭКСТРЕМАЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА”**

(ред. В.Е.Фортов, Е.А.Кузьменков)  
Москва 1991, ИВТАН (106 - 114)

**О КРИТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРАХ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА  
ГАЗ-ЖИДКОСТЬ В МЕТАЛЛАХ<sup>1</sup>**

И.Л. Иосилевский

Московский физико-технический институт

**НВ! Это невозможно !**

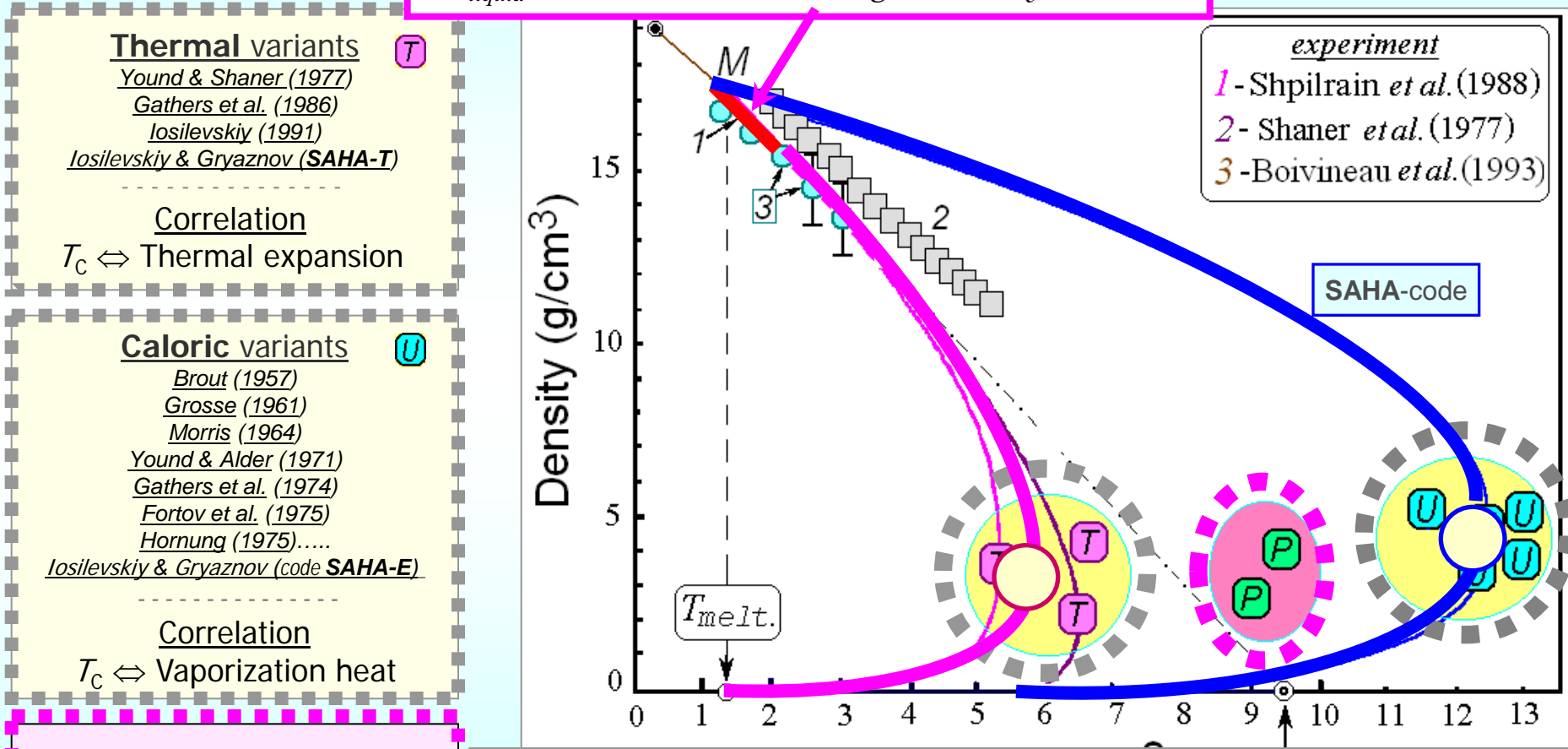
**1991**

Параметры критической точки (КТ) мы знаем только для части щелочных металлов и ртути. Для остальных металлов КТ находится в труднодоступной для экспериментов области высоких температур и давлений [1]. Поэтому информация о параметрах КТ металлов

(\* ) Материал данного сообщения докладывался на Сессии “Исследования неидеальной плазмы” Совета АН СССР по Физике Низкотемпературной Плазмы в ИВТАН в ноябре 1989

# Uncertainty in high- $T$ density-temperature diagram and parameters of Uranium critical point

Shpilrain *et al.* (JIHT\_1986) - Static experiment:  
 -  $\rho_{liquid}$  ( $1400 < T < 2100$  K) High accuracy - **0.7 % !**

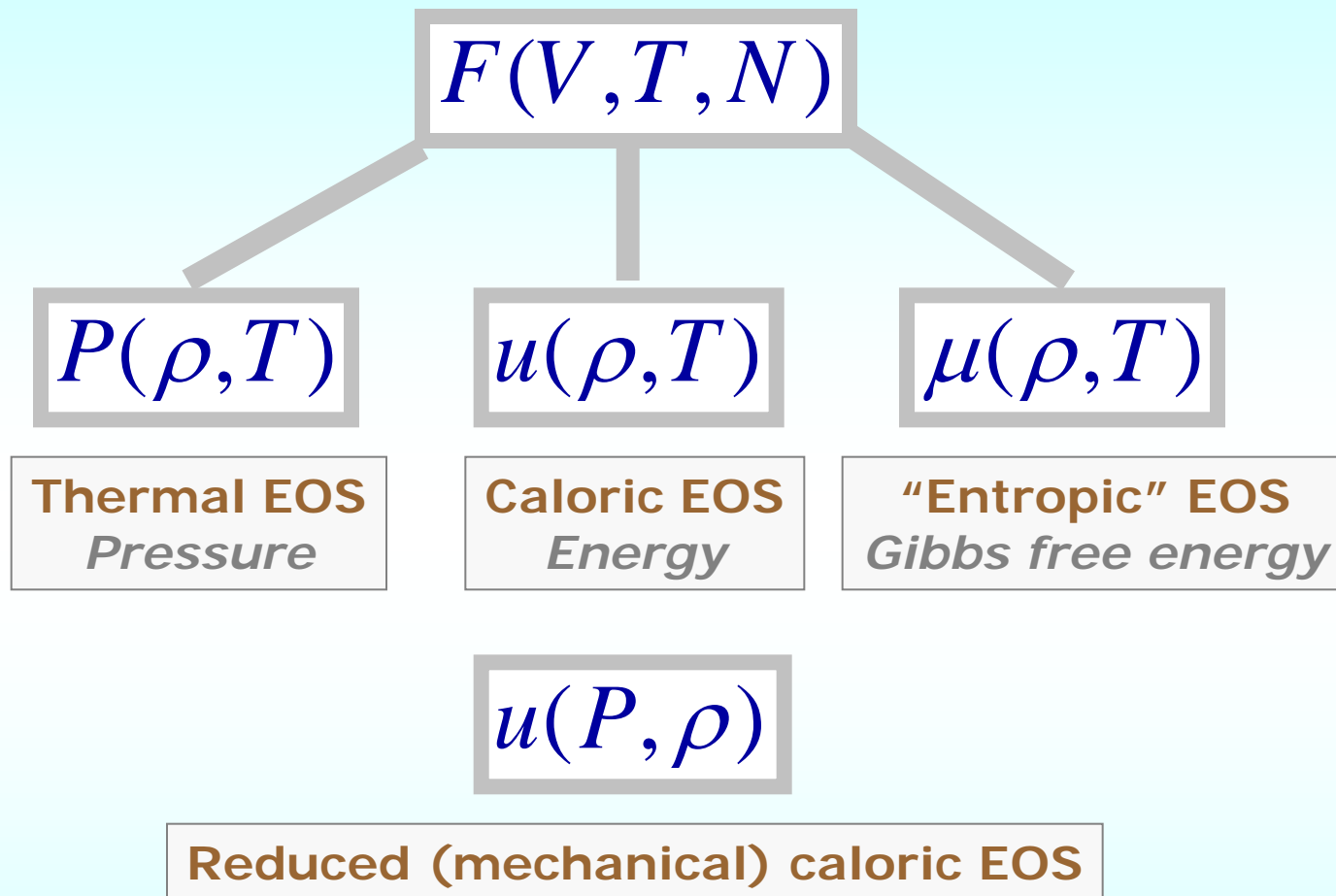


Extrapolation: (i) Guggenheim's formula, (ii) Law of Correspondent States (Iosilevskiy, 1990), (iii) - SAHA-code (Iosilevskiy & Gryaznov, J.N.M. (2005))

(i) 
$$\frac{\rho_{l,v}}{\rho_c} = 1 + b_1 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \pm b_2 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^\beta$$

(ii) 
$$\left(\frac{\rho(T/T_{cr})}{\rho_{cr}}\right)_U = \left(\frac{\rho(T/T_{cr})}{\rho_{cr}}\right)_{Cs}$$

# “Термодинамическая пирамида”



“Усеченное” Уравнение Состояния  $U(P, V)$  необходимо для замыкания уравнений гидродинамики при описании адиабатических течений

# Low- $T$ Uranium thermodynamics is known

Thermal EOS

$$\rho_{liq}(T)_{P \approx 0}$$

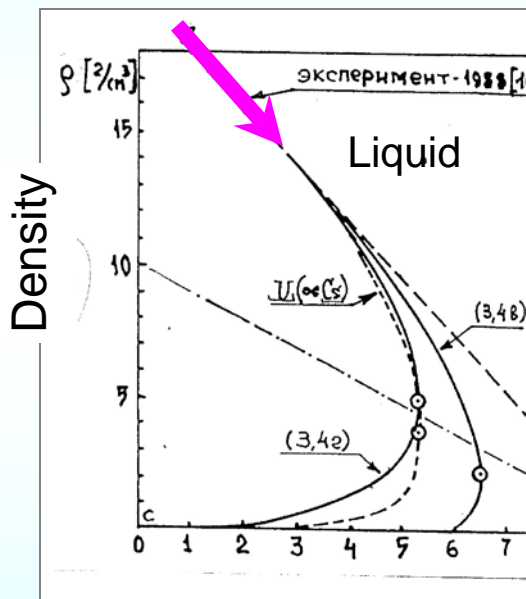
Caloric EOS

$$h_{liq}(T)_{P \approx 0}$$

Gibbs Free Energy  
 $\rightarrow$  Vapor pressure

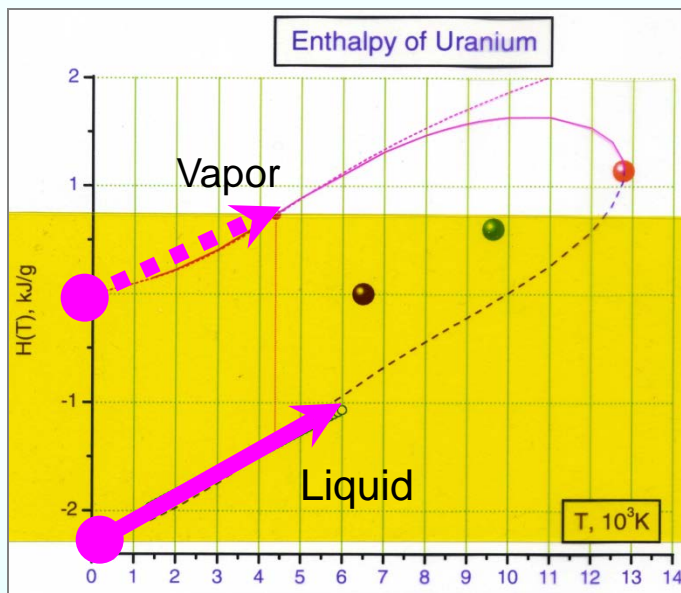
$$g(\rho, T)$$

$$P_s(T_s)$$



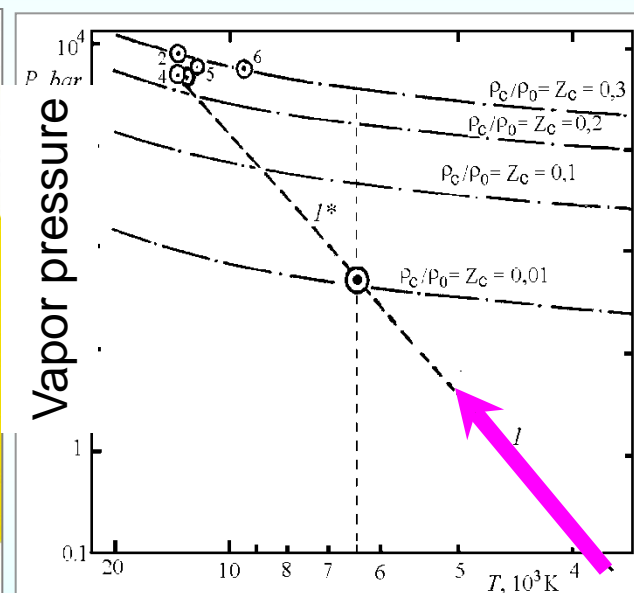
Temperature

Experiment



Temperature

Handbook (JIHT D-Base)



Temperature ( $1/T$ )

Handbook (JIHT D-Base)

$$T_{crit} \sim 5 - 7 \text{ kK}$$

$$T_{crit} \sim 11 - 13 \text{ kK}$$

$$P_{crit} \sim 10^2 - 10^4 \text{ bar}$$



## В чем проблема ?

Построение теоретического Уравнения Состояния (Широкодиапазонный УРС, Химическая модель, "Первопринципный" расчет...и др.) способного **одновременно** описать **низкотемпературные** данные **ВСЕХ ТРЕХ** экспериментально известных "проекций" Уравнения Состояния Жидкого Урана – **Термического, Калорического, Энтропийного**

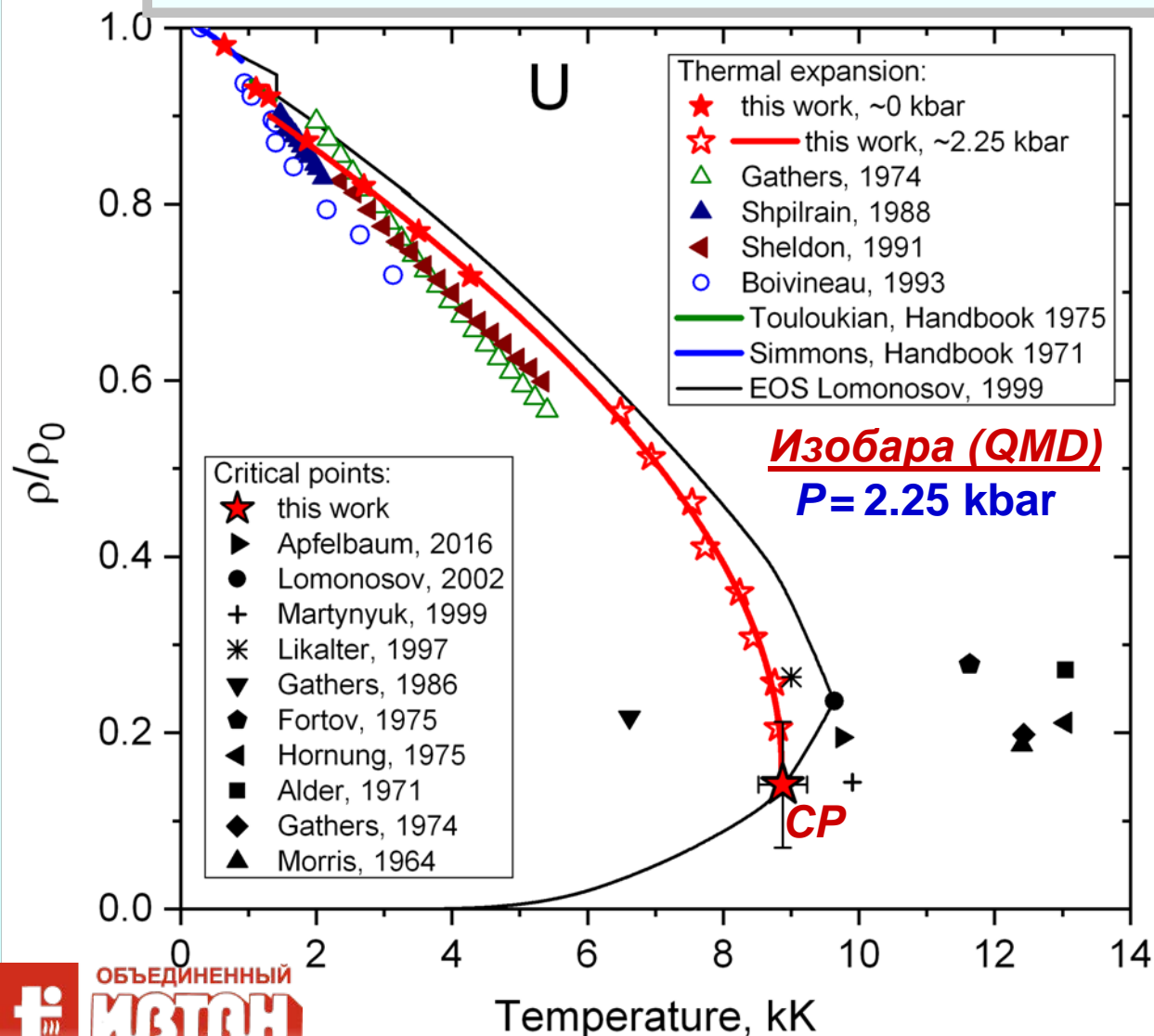
!!!



# Первопринципные расчеты (QMD)

“Численный Эксперимент” !!

М.Парамонов, Д. Минаков, П. Левашов – Эльбрус-2020



Critical point:

$$T_c = 8.9 \pm 0.4 \text{ kK};$$

$$P_c = 2.25 \pm 0.7 \text{ kbar};$$

$$\rho_c = 2.75 \pm 1.4 \text{ g/cm}^3;$$

$$Z_c = 0.26 \pm 0.13$$

Good agreement with Shpil'rain (1988) at the melting point.  
Slope is close to Sheldon (1991) and Lomonosov (Doctoral Thesis).  
Critical temperature is close to the Likalter (1997), Martynyuk(1999), Lomonosov (2002), Apfelbaum (2016)

# Uncertainty in high- $T$ density-temperature diagram and parameters of Uranium critical point

Shpilrain *et al.* (JIHT\_1986) - Static experiment:  
 -  $\rho_{liquid}$  ( $1400 < T < 2100$  K) High accuracy – **0.7 % !**

**Thermal variants** T  
 Yound & Shaner (1977)  
 Gathers *et al.* (1986)  
 Iosilevskiy (1991)  
 Iosilevskiy & Gryaznov (SAHA-T)

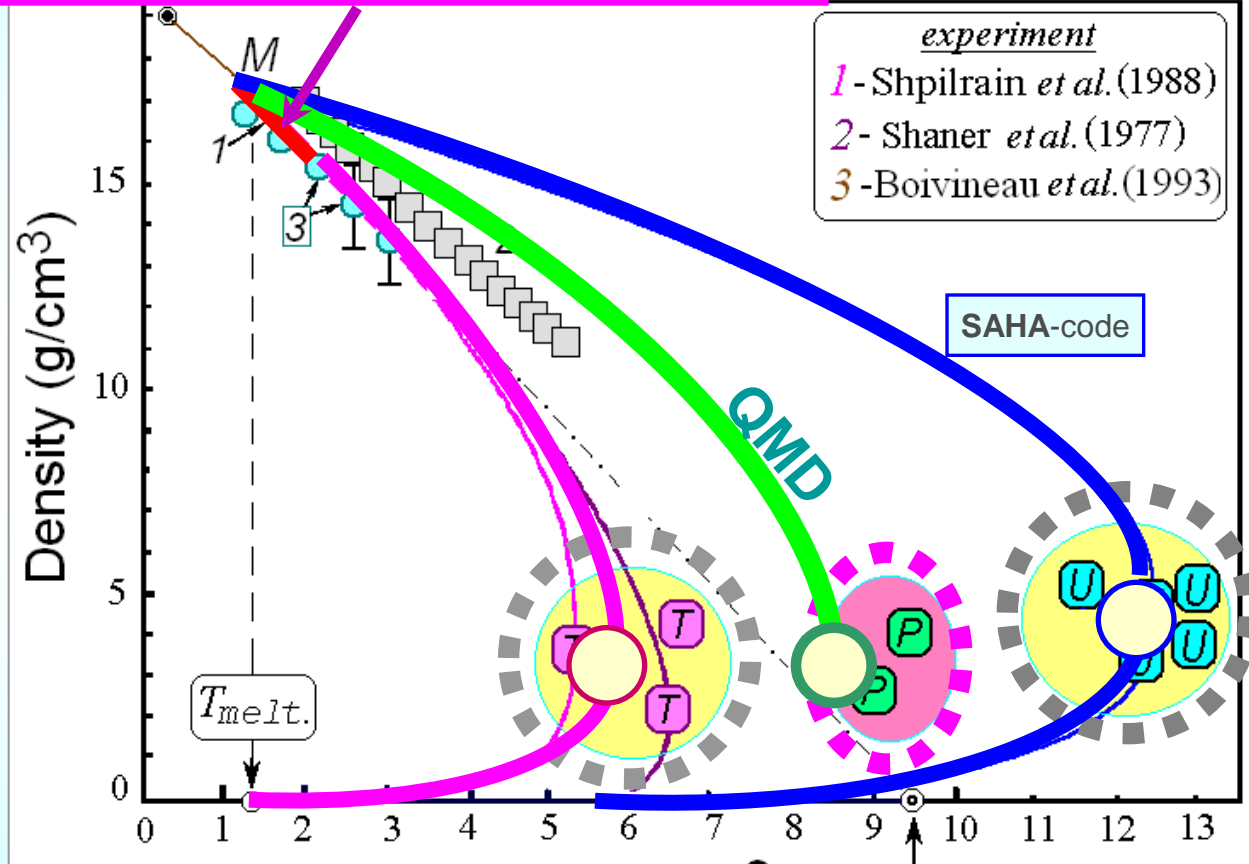
Correlation  
 $T_c \Leftrightarrow$  Thermal expansion

**Caloric variants** U  
 Brout (1957)  
 Grosse (1961)  
 Morris (1964)  
 Yound & Alder (1971)  
 Gathers *et al.* (1974)  
 Fortov *et al.* (1975)  
 Hornung (1975).....  
 Iosilevskiy & Gryaznov (code SAHA-E)

Correlation  
 $T_c \Leftrightarrow$  Vaporization heat

**Plasma Hypothesis** P  
 Likalter (1981)  
 Likalter + Hess (1997)

Correlation  
 $T_c \Leftrightarrow$  Ionization Potential



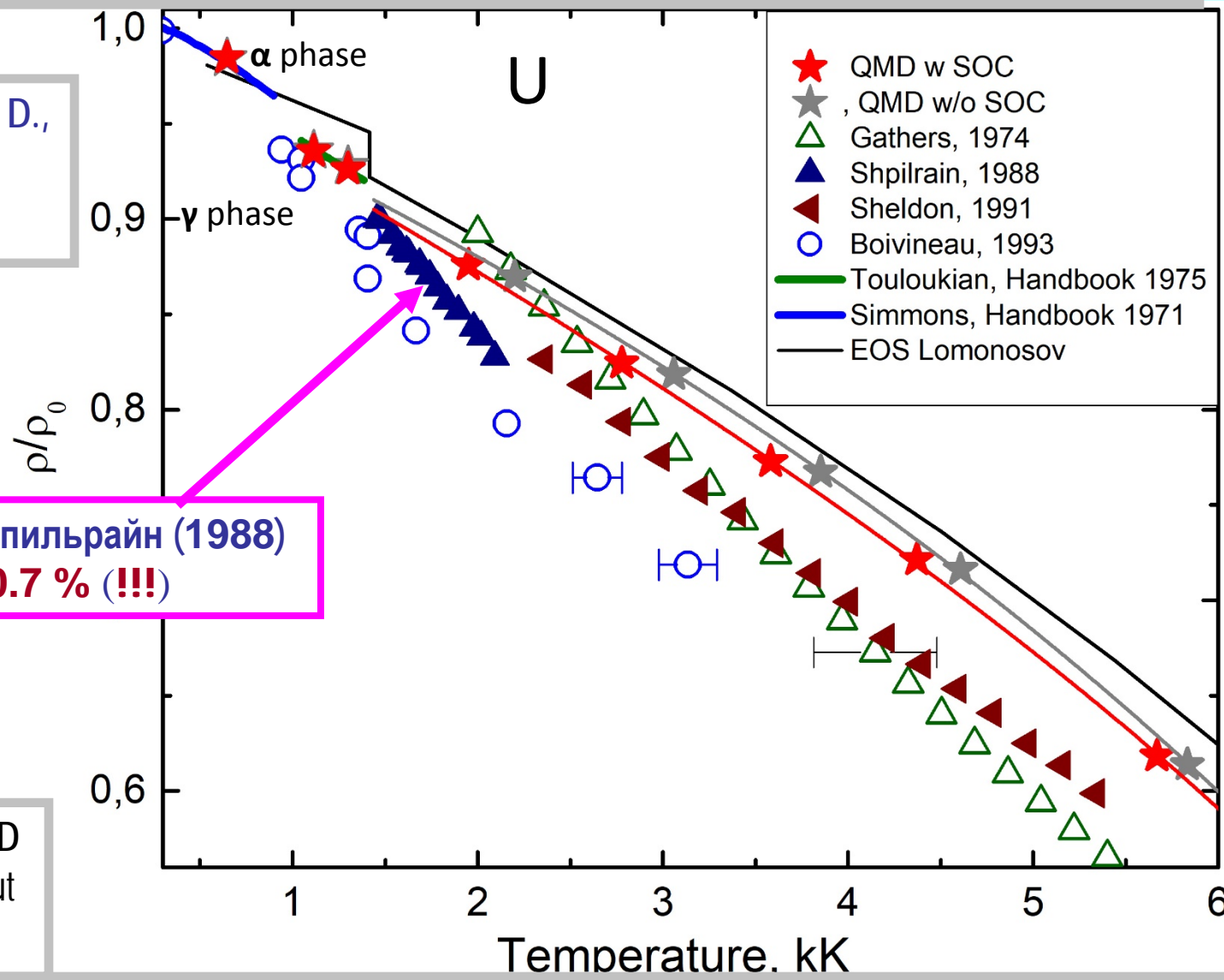
Extrapolation: (i) Guggenheim's formula, (ii) Law of Correspondent States (Iosilevskiy, 1990), (iii) SAHA-code (Iosilevskiy & Gryaznov, 2005)

(i) 
$$\frac{\rho_{l,v}}{\rho_c} = 1 + b_1\left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \pm b_2\left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^\beta$$

(ii) 
$$\left(\frac{\rho(T/T_{cr})}{\rho_{cr}}\right)_U = \left(\frac{\rho(T/T_{cr})}{\rho_{cr}}\right)_{Cs}$$

# Isobaric expansion of Uranium – QMD vs Exp-t

Paramonov M., Minakov D.,  
Levashov P.,  
Elbrus - 2020



Эксперимент – Э.Шпильраин (1988)  
Точность – 0.7 % (!!!)

Red and Gray stars – QMD calculation with and without spin-orbit coupling

Good agreement with experimental value of molten density of U by Shpil'rain (1988) at the melting point. Slope of the isobaric expansion curve in liquid state is consistent with IEX experiment by Sheldon (1991) and EOS by Lomonosov (Doctoral Thesis)

## Актуальный вопрос ?

*Эксперимент Э.Шпильрайна и др. –  $T_{кр} \sim 5-7$  кК*  
– **Эксперимент реальный**

*Первопринципные расчеты (DFT/MD)*  
*П.Левашова, Д.Минакова и М.Парамонова –*  
 $T_{кр} \sim 8.9 \pm 0.4$  кК – **“Эксперимент численный”**

**“Кому мы должны верить ??...”**



2021

Авторам не известно НИ ОДНОГО (!)  
Теоретического Уравнения Состояния  
(Широкодиапазонный УРС, Химическая модель,  
"Первопринципный" расчет...и др.)  
способного **удовлетворительно**  
ОПИСАТЬ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ данные **ВСЕХ**  
**ТРЕХ** экспериментально известных **ветвей**  
**Уравнения Состояния Жидкого Урана –**  
**Термического, Калорического,**  
**Энтропийного**

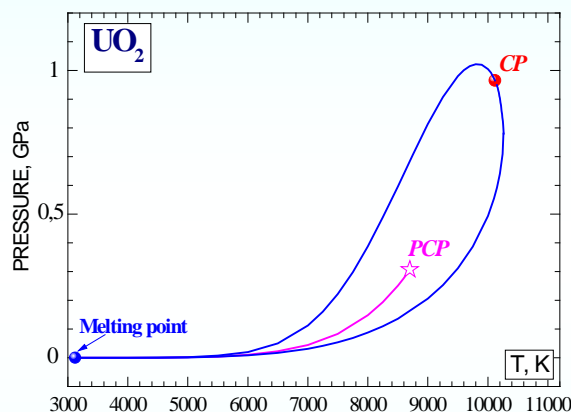
!!!

**Проблема ждет своего решения !**



# Неконгруэнтный фазовый переход

в продуктах нагрева диоксида урана



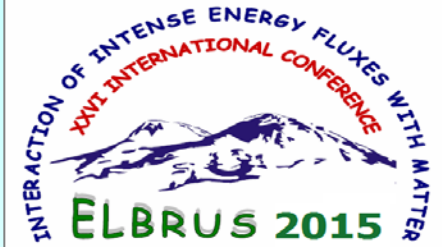
1998 г

Иосилевский И.Л., Грязнов В.К., Якуб Е.С., Фортов В.Е.

Ronchi C., Nyland J.

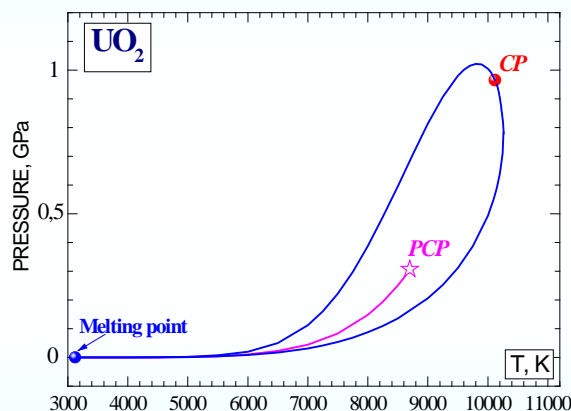
Московский физико-технический институт  
Институт Проблем Химической Физики РАН  
Институт Высоких Температур РАН





# Неконгруэнтные фазовые переходы

*в плазме* **ЗЕМНЫХ** и **КОСМИЧЕСКИХ** приложений



**И.Л. Иосилевский, В.К. Грязнов**

*Объединенный Институт Высоких Температур РАН  
Институт Проблем Химической Физики РАН  
Московский физико-технический институт*



# Неконгруэнтные фазовые переходы

( определение )

Неконгруэнтный (или *инконгруэнтный*) ФП -

- когда сосуществующие фазы имеют

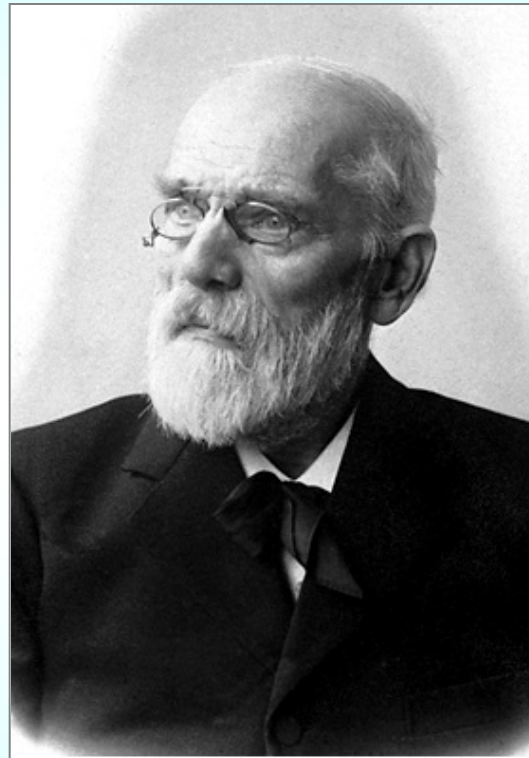
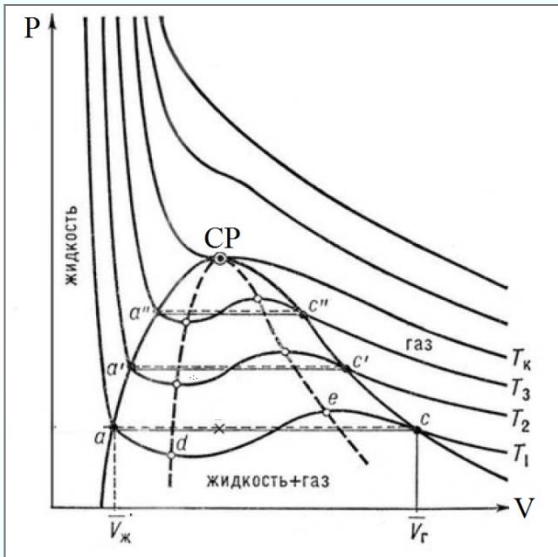
*разный химический состав !*

*/ или эквивалент "химического" состава /*

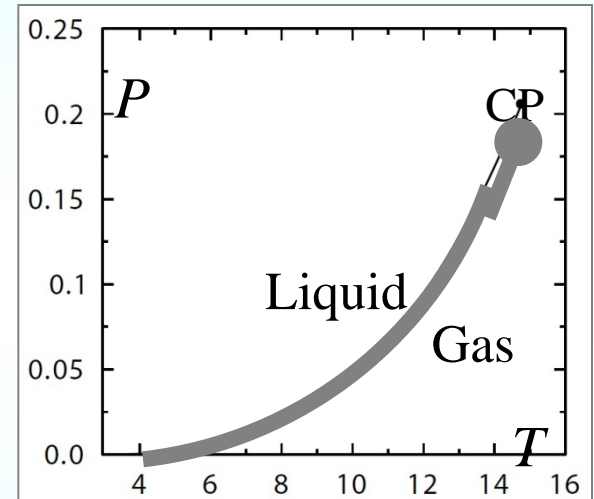
**(ядерное вещество, кварк-адронная плазма)**

# VdW PT -- typical enthalpic phase transition

$$(P + a\rho^2)(1 - \rho b) = \rho T,$$



Ян Дидерик Ван-дер-Ваальс



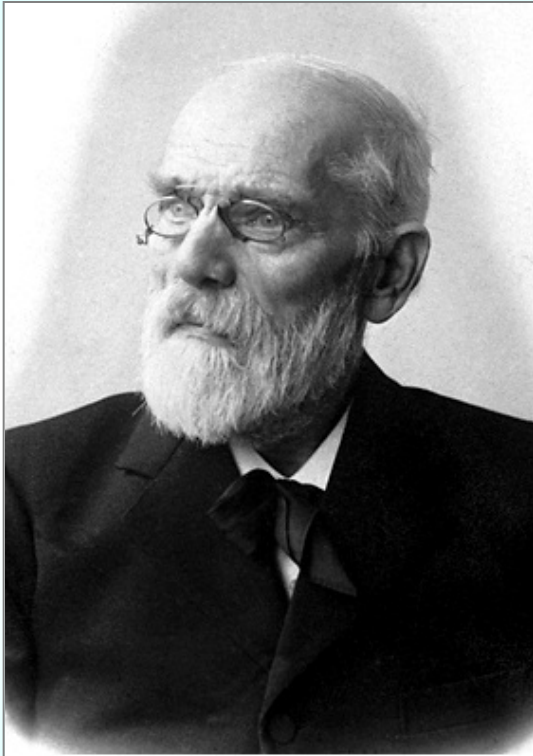
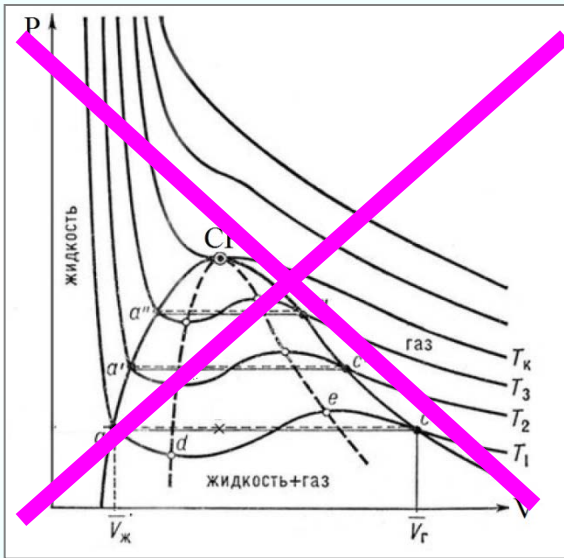
Two-phase region  
Binodals, Spinodals  
Critical Point  
VdW-loops at iso-T  
Two metastable zones  
Unstable state region  
etc . . . . .

*Rectilinear Diameter Rule,  
Linearity for  $\ln P_s \Leftrightarrow 1/T_s$   
Kopp-Lang Rule,  
Timmerman's Rule,  
"Bermuda Triangle" Rule,  
Zeno-Line Rule ....  
etc . . . . .*

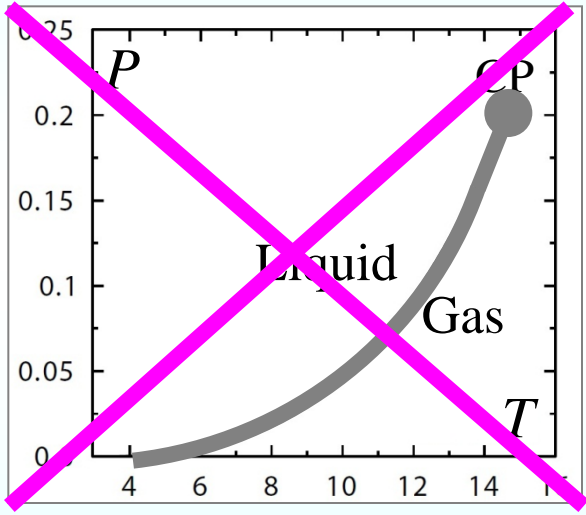


# And what is about **non-congruent** phase transition ?

## And what is about **entropic** phase transition ?



Ян Дидерик Ван-дер-Ваальс



- Two-phase region* - **differs**
- Binodals, Spinodals* - **differs**
- Critical Point* - **differs**
- VdW-loops at iso-T* - **differs**
- Metastable regions* - **differs**
- Unstable regions* - **differs**
- Etc . . . . .*

- ~~*Rectilinear Diameter Rule,*~~
- ~~*Linearity for  $\ln P_s \Leftrightarrow 1/T_s$*~~
- ~~*Kopp-Lang Rule,*~~
- ~~*Timmermans Rule,*~~
- ~~*"Bermuda Triangle" Rule,*~~
- ~~*Zeno-Line Rule ....*~~
- ~~*etc . . . . .*~~

> **25 лет назад – 1995**

# Неконгруэнтные фазовые переходы

*применительно к проблеме*

## ***безопасности ядерных реакторов***

(so-called severe accidents –

– т.наз. “запредельные” ядерные аварии)

INTAS 93-66 // ISTC 2107 // ITU – IVTAN Contract

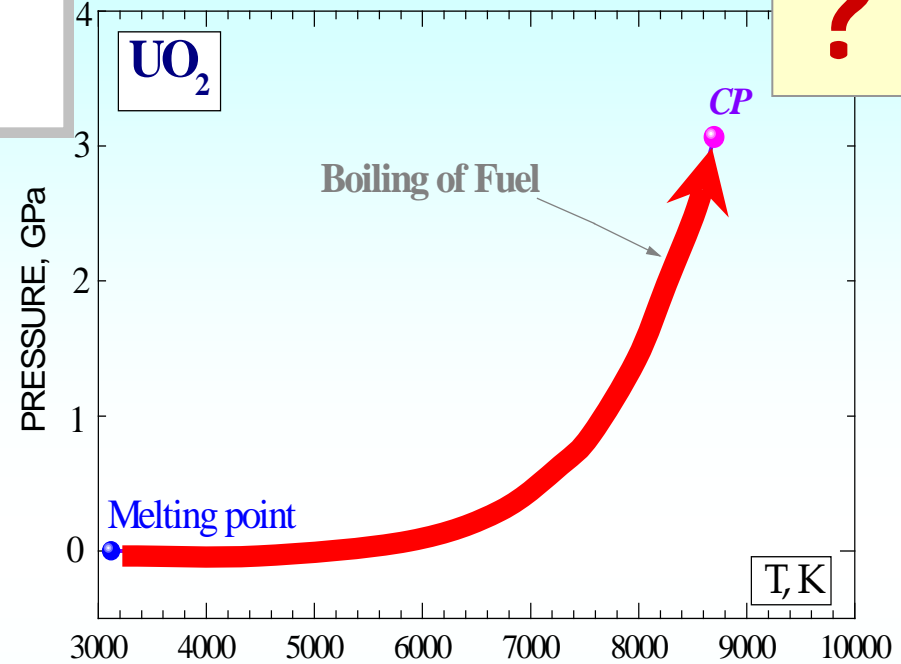
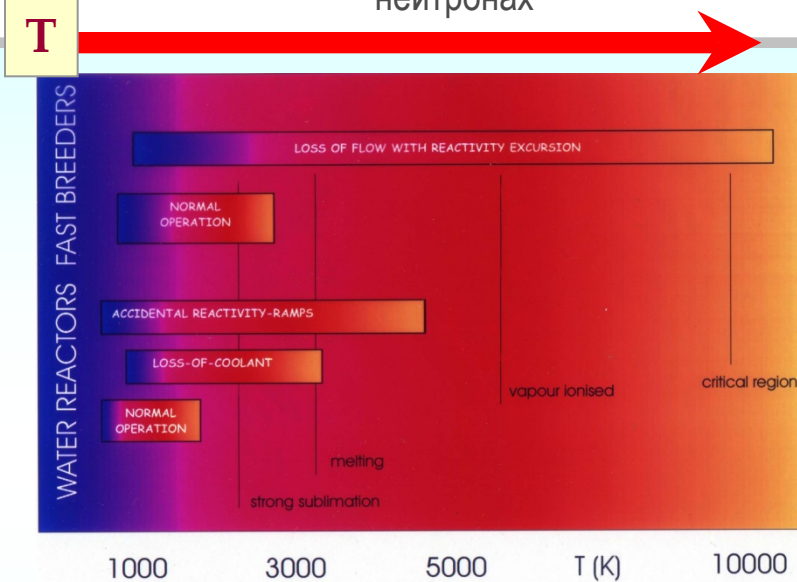
**Цель работы - “Уравнение состояния  
и неконгруэнтное испарение диоксида**

**урана”**

**И эта работа также была инициирована  
и энергично поддержана В.Е.Фортовым**

# Неконгруэнтное испарение диоксида урана

Ожидаемый **уровень температур** при гипотетической "запредельной" ядерной аварии реактора на быстрых нейтронах



## INTAS Project (1995–2002)

Cooperation: MIPT – IHED RAS – IPCP RAS – OSEU – MPEI ↔ ITU (JRC, Germany)

Project Coordinator – C. Ronchi (ITU, JRC) ↔ Project Supervisor – **V. Fortov**

## ISTC Project (2002–2005)

Cooperation: MIPT – IHED RAS – IPCP RAS – ITEP – VNIIEF ↔ GSI (JRC, Germany)

Project Manager – B. Sharkov (ITEP, Moscow) ↔ Project Scientific Supervisor – **V. Fortov**

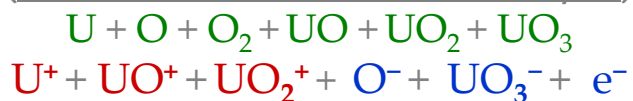


# Модель уравнения состояния - II

## ("Химическая модель плазмы")

### Ионно-молекулярная модель состава

(и для жидкой и для газовой фаз)



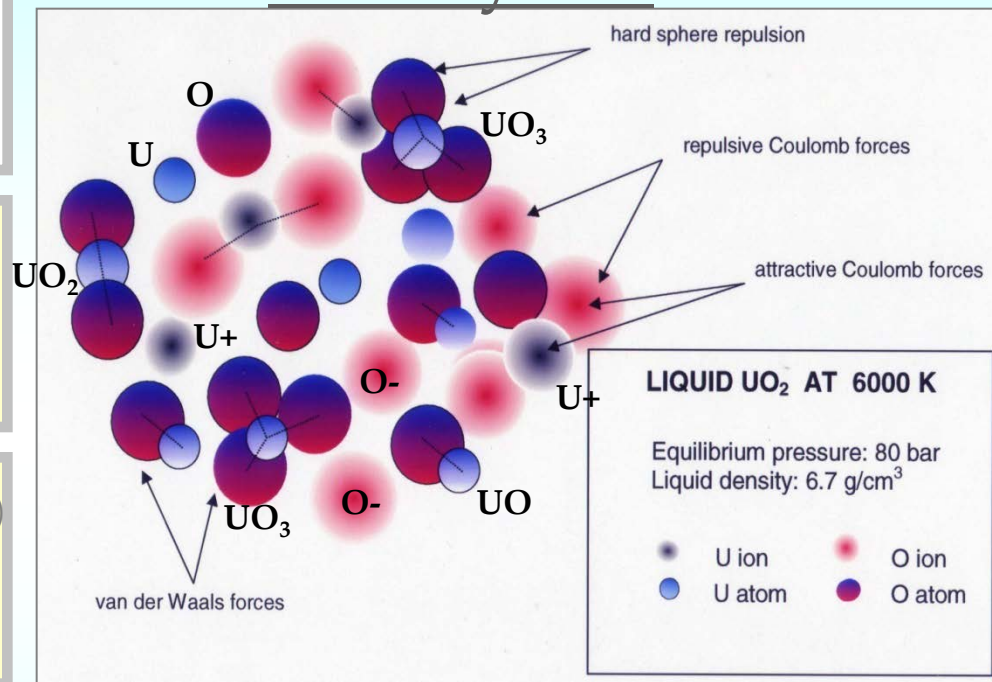
### Эффективное взаимодействие:

- Intensive short-range repulsion
- Coulomb interaction between charged particles
- Short-range effective attraction between all particles

### Поправки на неидеальность: (Modified for mixtures)

- Hard-sphere mixture with varying diameters
- Modified Mean Spherical Approximation
- Modified Thermodynamic Perturbation Theory

### U - O system



Iosilevskiy I., Yakub E., Hyland G., Ronchi C. *Trans. Amer. Nucl. Soc.* **81** (1999) // *Int. Journ. Thermophysics* **22** (2001)

Грязнов В.К., Иосилевский И.Л. Семенов А.М. Якуб Е.С., Фортов В.Е., Ronchi C., Hyland G.J., // *Известия РАН*, **63** (1999)

Iosilevskiy I., Gryaznov V., Yakub E., Ronchi C., Fortov V. *Contrib. Plasma Phys.* **43**, (2003)

Иосилевский И.Л., Грязнов В.К., Семенов А.М., Якуб Е.С., Фортов В.Е., Ronchi C., Hyland G.J., *ВАНТ*, вып. 1, (2003)

Ronchi C., Iosilevskiy I., Yakub E., *Equation of State of Uranium Dioxide* / Springer, Berlin, (2004)

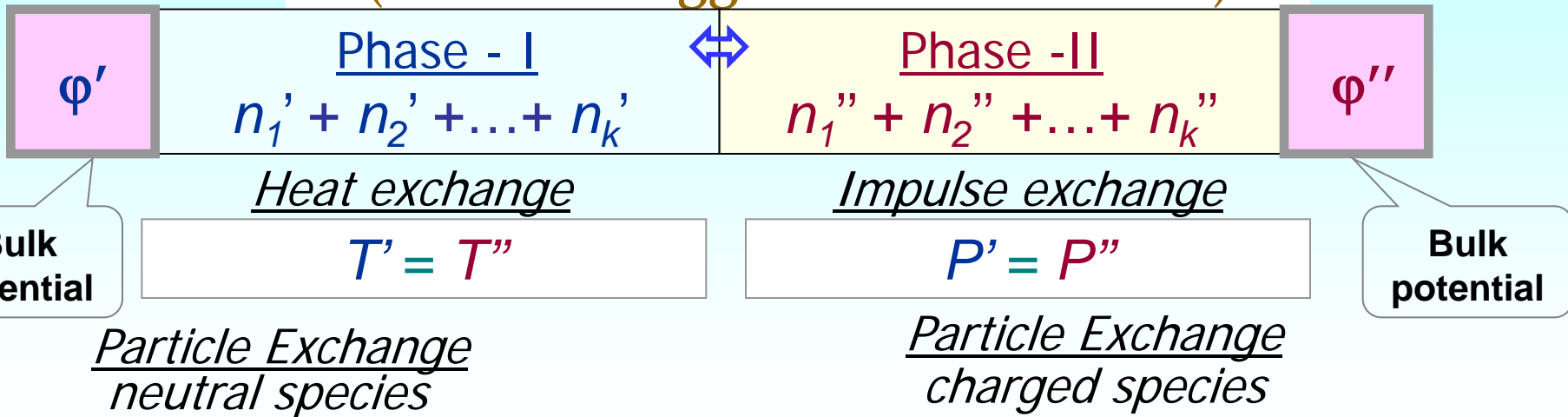
Иосилевский И.Л., Красников Ю.Г., Сон Э.Е., Фортов В.Е. *Термодинамика и Транспорт в Неидеальной Плазме*, МФТИ, Москва, (2000) // *ФИЗМАТЛИТ*, Москва, (2012) (в печати)

Иосилевский И.Л., Грязнов В.К., Семенов А.М., Якуб Е.С., Горохов Л.Н., Юнгман В.С., Башарин А.Ю., Брыкин М.В., Шейндлин М.А., Фортов В.Е., Ronchi C., Hyland G.J., Pflieger R. // *Известия РАН (Энергетика)*, N 5, 115 (2011)



# Phase equilibrium in reacting **Coulomb** system

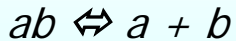
(Gibbs – Guggenheim conditions)



Particle Exchange  
neutral species  
(Gibbs)

$$\begin{aligned} \mu_1'(P, T, x') &= \mu_1''(P, T, x'') \\ \mu_2'(P, T, x') &= \mu_2''(P, T, x'') \\ &\dots\dots\dots \\ \mu_k'(P, T, x') &= \mu_k''(P, T, x'') \end{aligned}$$

Equilibrium reactions



(reduced number of basic units)

Uranium – Oxygen system

$$\begin{aligned} \mu_U'(P, T, x') &= \mu_U''(P, T, x'') \\ \mu_O'(P, T, x') &= \mu_O''(P, T, x'') \end{aligned}$$

**NB!** - Chemical potentials of charged species are **not equal** (Guggenheim, 1929)

Electro-chemical potentials are equal

$$\mu_i' + Z_i e \phi' = \mu_i'' + Z_i e \phi'' \quad \Leftrightarrow \quad \Delta\phi(T)$$

Potential drop at mean-phase interface in equilibrium Coulomb system

$$\begin{aligned} \mu_1'(P, T, x') &= \mu_1''(P, T, x'') + Z_1 e \Delta\phi(T) \\ \mu_2'(P, T, x') &= \mu_2''(P, T, x'') + Z_2 e \Delta\phi(T) \\ &\dots\dots\dots \\ \mu_e'(P, T, x') &= \mu_e''(P, T, x'') - e \Delta\phi(T) \end{aligned}$$

# Неконгруэнтное испарение в U-O системе

Совместное фазовое, ионизационное и химическое равновесие  
согласно условиям Гиббса – Гугенхейма

Диаграмма давление - плотность

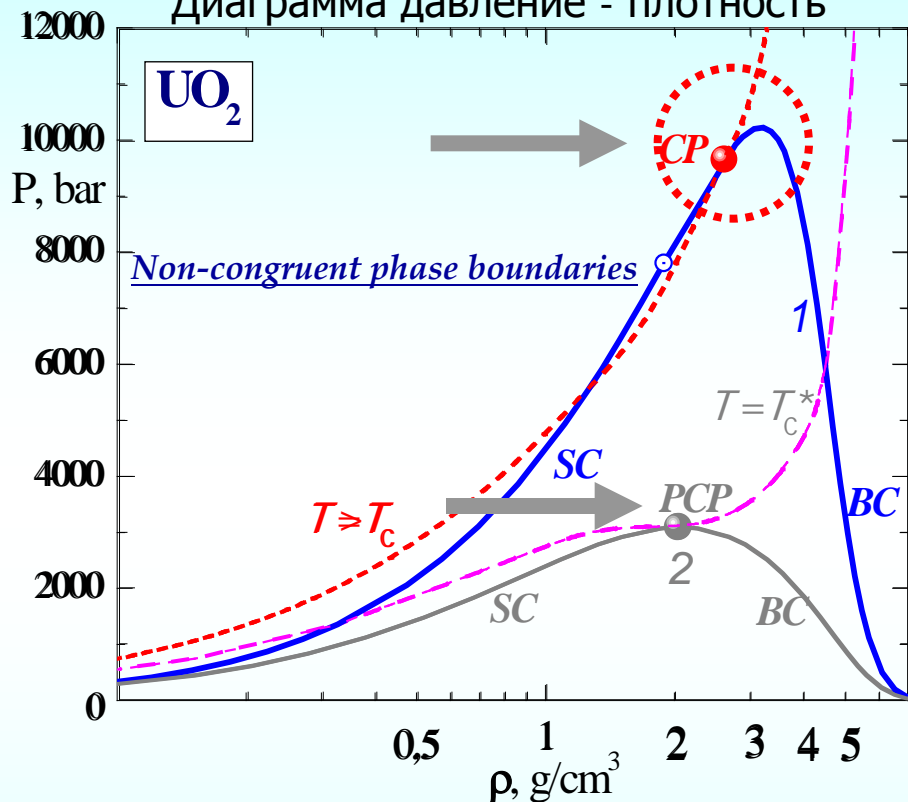
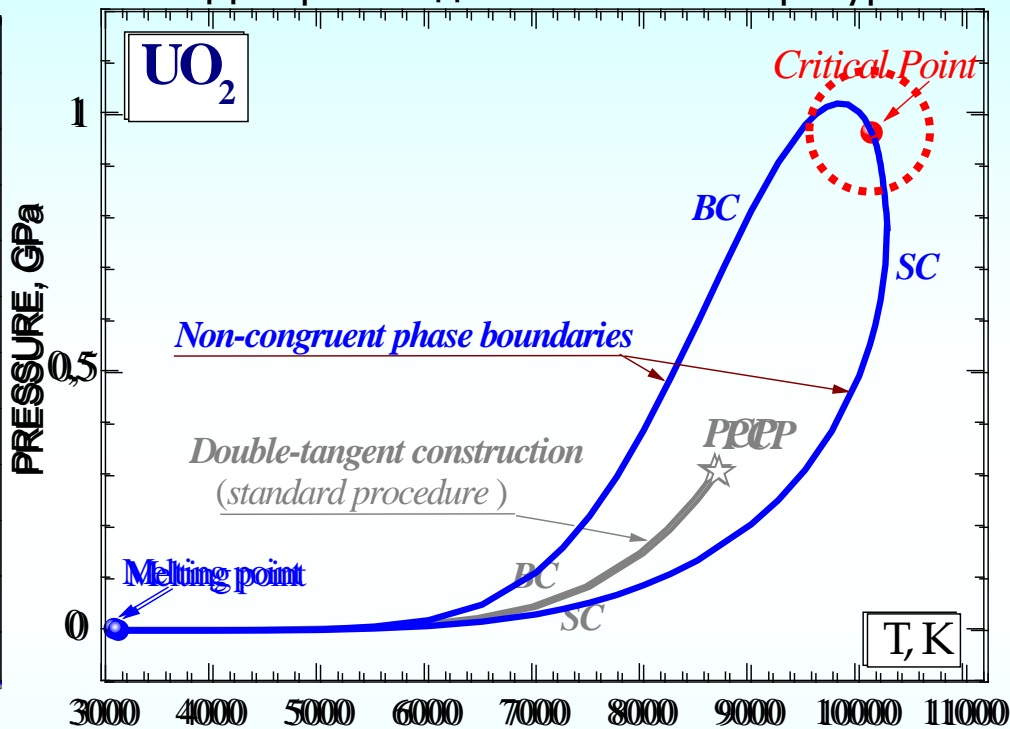


Диаграмма давление - температура



1 – Неконгруэнтное (полное) равновесие

2 – Принудительно-конгруэнтное равновесие

BC – Граница кипения жидкости

SC – Граница насыщения пара

**NB!** 2-dimensional two-phase region instead of standard  $P$ - $T$  saturation curve

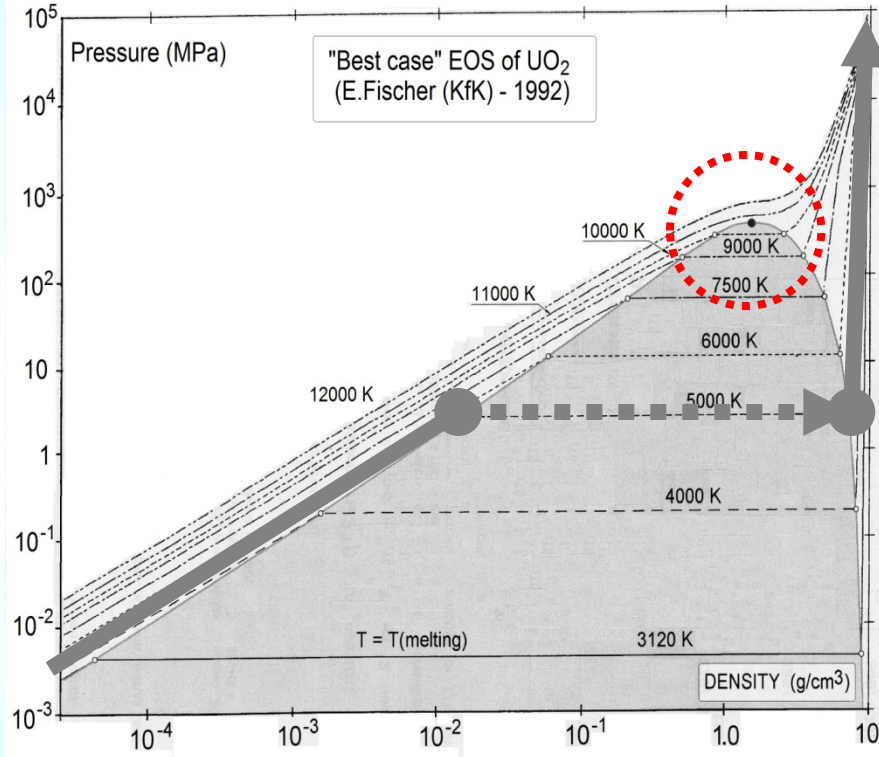
**NB!** High pressure level of non-congruent phase decomposition

**NB!** Critical point should be of non-standard type:  $(\partial P / \partial V)_T \neq 0$   $(\partial^2 P / \partial V^2)_T \neq 0$

It should be instead:  $(O/U)_{\text{liquid}} = (O/U)_{\text{vapor}}$  and  $\{ \partial \mu_i / \partial n_k \}_T \}_{CP} = 0$

# Ход изотерм в двухфазной области

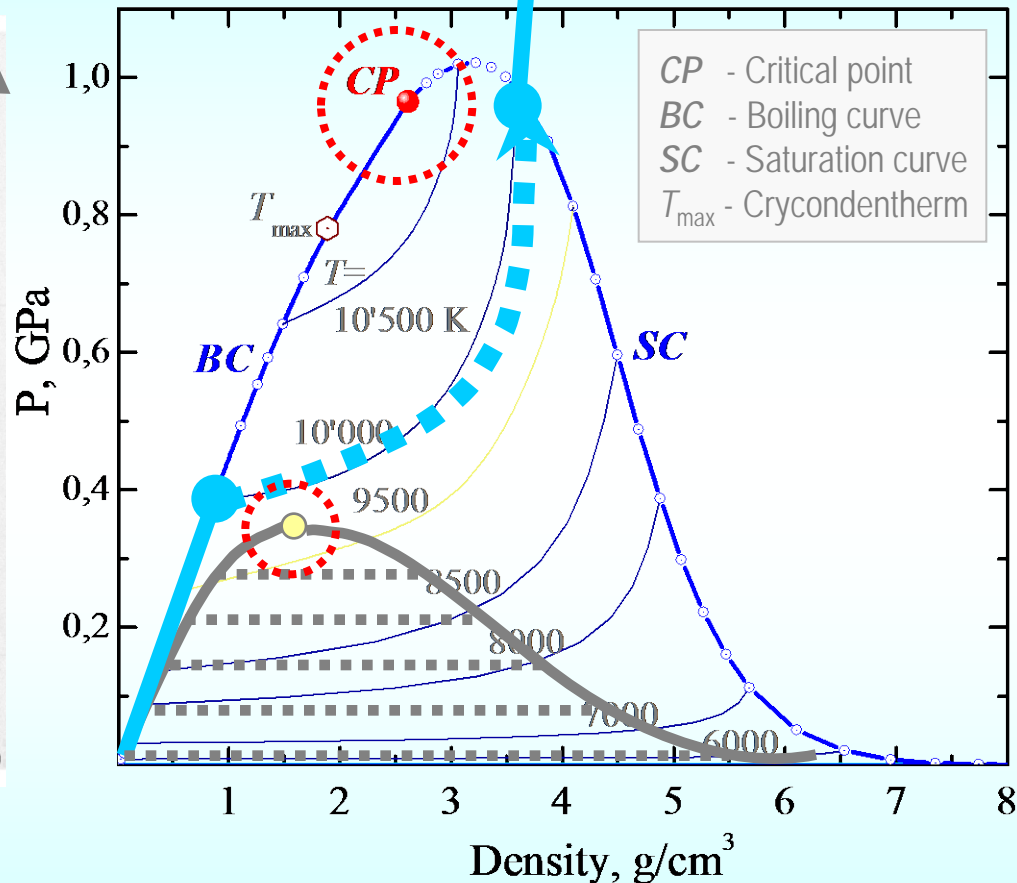
**Стандартный сценарий**  
(принудительно-конгруэнтный)



Fischer E.A. *J. Nucl. Sci. Eng.* (1989)

**NB!**

**Неконгруэнтное испарение**



**Изотермический фазовый переход начинается и заканчивается при *разных* давлениях**

**Изобарический фазовый переход начинается и заканчивается при *разных* температурах**

# Термодинамика неконгруэнтных фазовых переходов

Двухфазная область в интенсивных переменных ( $P$ - $T$ ,  $\mu$ - $T$ ,  $\mu$ - $P$ )

Граница двухфазной области неконгруэнтного фазового перехода в  $P$ - $T$ ,  $\mu$ - $T$  и  $\mu$ - $P$  является **двумерной областью** (а не 1-D кривой)

Пересечение двухфазной области по изотермам и изобарам

*изо- $T$  переход уже более не изо- $P$   $\Leftrightarrow$  изо- $P$  уже более не изо- $T$*

Критическая точка

В критической точке неконгруэнтного фазового перехода

**НЕ** выполняются стандартные условия: - в этой точке  $(\partial P / \partial V)_T \neq 0$

должно быть:  $(O/U)_{\text{liquid}} \neq (O/U)_{\text{vapor}}$  и  $\{ \partial \mu_i / \partial n_k \}_T \}_{\text{CP}} = 0$

Динамика неконгруэнтных фазовых переходов

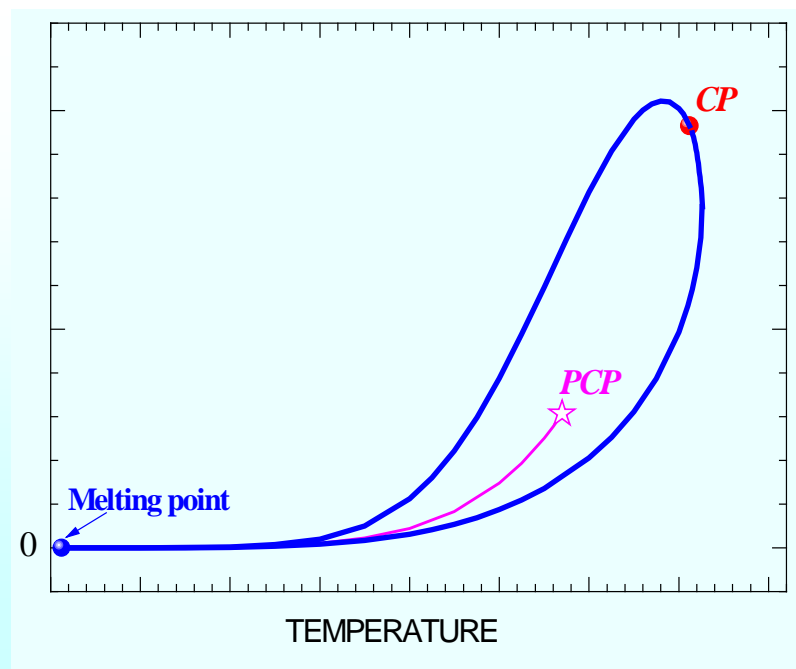
Параметры неконгруэнтного фазового превращения **существенно зависят от скорости** перехода



# Неконгруэнтный фазовый переход в системе уран – кислород

?

Правило *или* исключение



## Общее правило:

**Любой** фазовый переход в системе из **двух** и **более** химических элементов должен быть **неконгруэнтным** !

## Исключение:

Фазовые переходы в химических соединениях сохраняющих **моно-молекулярную структуру**, например, **H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub> ... etc**, при “**комнатных температурах**” !

## NB !!

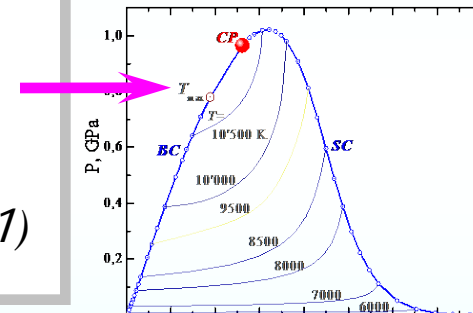
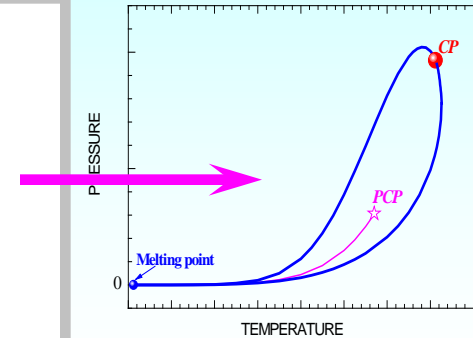
Фазовые переходы в тех же компаундах должны быть **неконгруэнтными (!)** в условиях, соответствующих **недрам планет** ( $T \sim 1-10$  kK,  $P \sim$  Mbar)

# Hypothetical non-congruent phase transitions

(*short list*)

## Terrestrial applications:

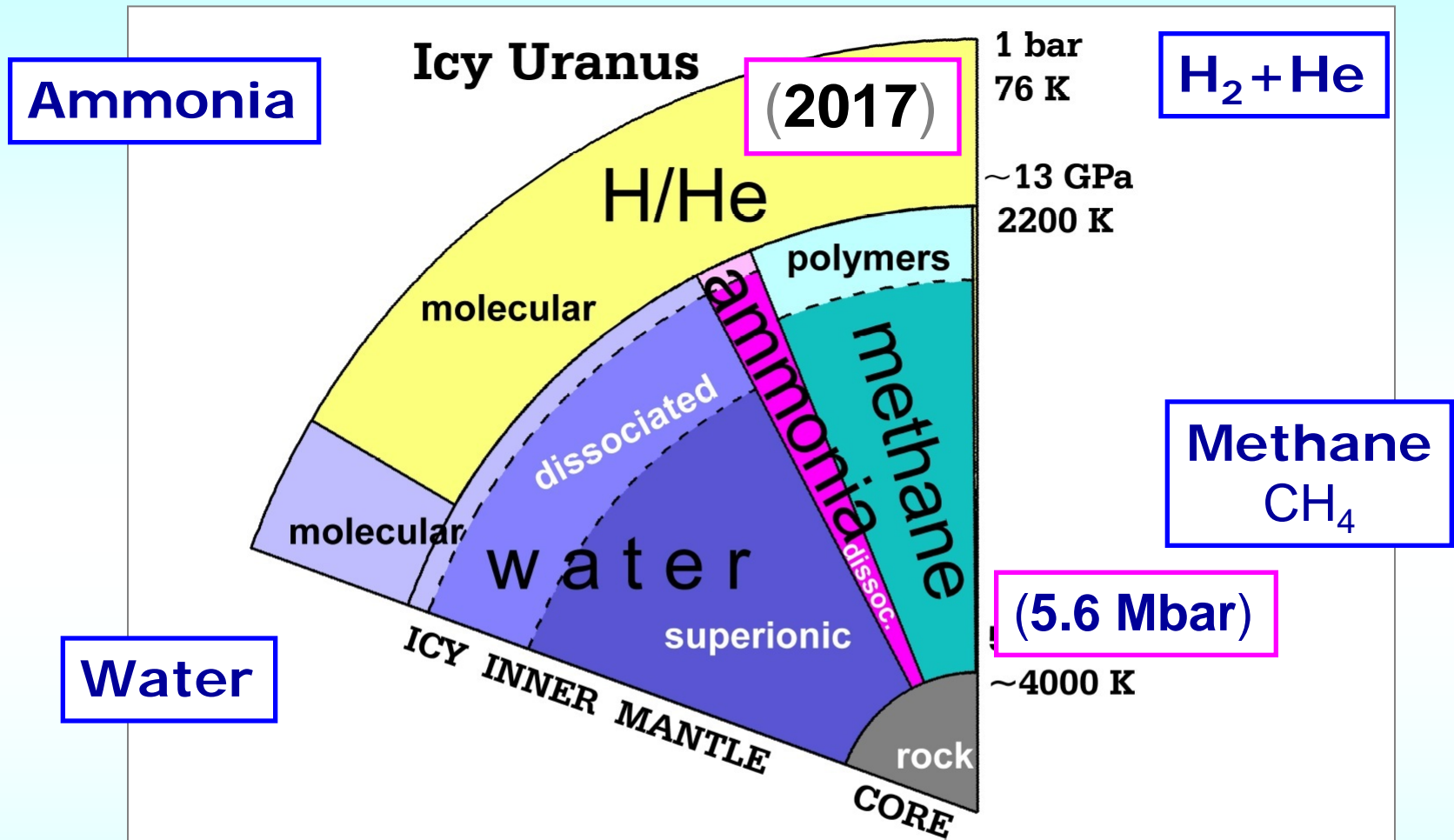
- *Uranium- and Plutonium-bearing compounds:*
  - $UO_2$ ,  $PuO_2$ ,  $(Pu+U)O_2$ ,  $UC$ ,  $UN$ , ... etc.,
- *Metallic alloys:* (K-Na, ... Pb-Bi ... etc.)
- *Oxides:* ( $SiO_2$ ,  $MgO$ ,  $Al_2O_3$ , ... etc.)
- *Hydrides of metals* ( $LiH$  ... etc.)
- *Ionic liquids and Molten salts:*
  - *alkali halides* ( $NaCl$  ... etc.)
- *“Dusty” and Colloid plasmas:*  
(Coulomb mix of macro-ions  $+Z_1 + Z_2 + \dots$  and micro-ions:  $+1, -1$ )



## Non-Congruence in Cosmic Matter:

- *Plasma and Dissociative Phase Transitions in mixtures:  $H_2$  / He /  $H_2O$  /  $NH_3$  /  $CH_4$  in Giant Planets, Brown Dwarfs and Extra-Solar Planets*
- *Phase Transitions in White Dwarfs* (Non-congruent Crystallization... etc.)
- *Phase Transitions in Neutron Stars* (“Structured Mixed Phase” transition... etc.)
- *Phase Transitions in “Strange” Stars* (Quark – Hadron transition ... etc.)

# Проблема Фазовых Переходов в “Ледяных” Планетах ?

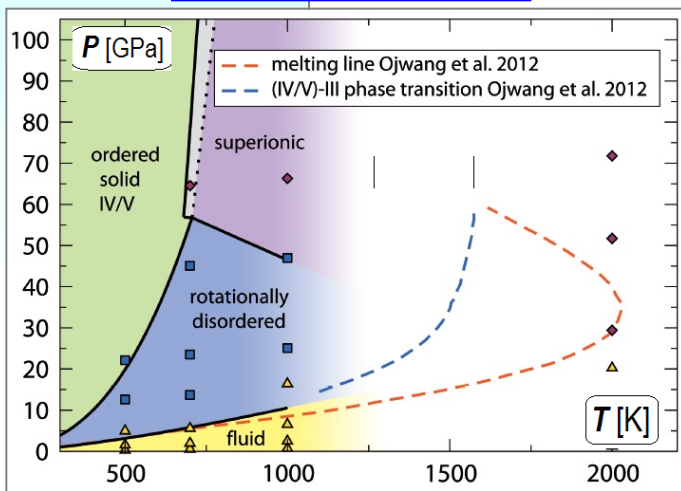


Bethkenhagen M., Meyer E.R., Hamel S., Nettelmann N., French M., Scheibe L., Ticknor C., Collins L.A., Kress J.D., Fortney J.J., Redmer R.  
*Planetary Ices and the Linear Mixing Approximation* // [arXiv:1709.04133](https://arxiv.org/abs/1709.04133)

**Figure 6.** Icy Uranus structure model with three homogeneous layers (*solid* azimuthal lines). The radial direction scales linearly

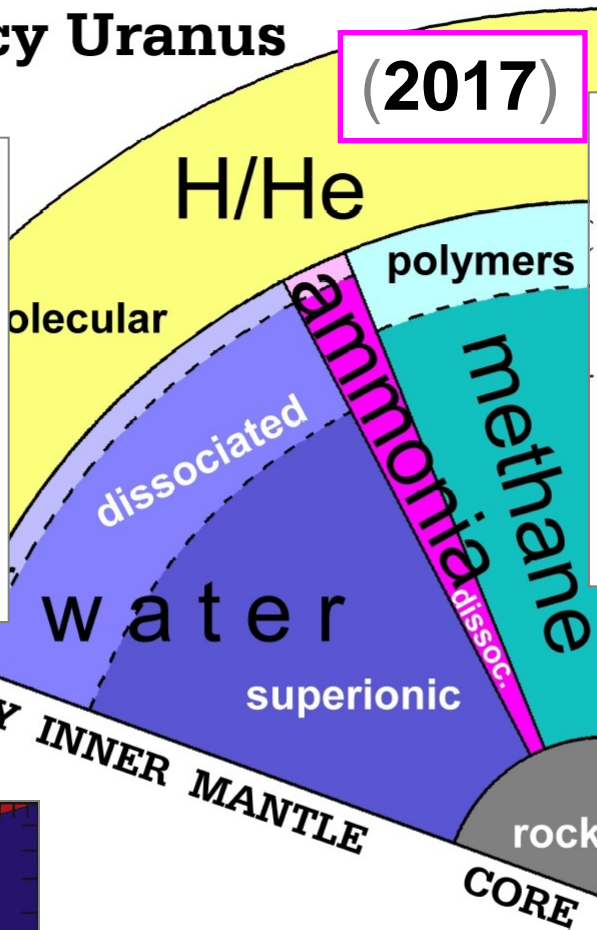
# Проблема Фазовых Переходов в “Ледяных” Планетах ?

**Ammonia**



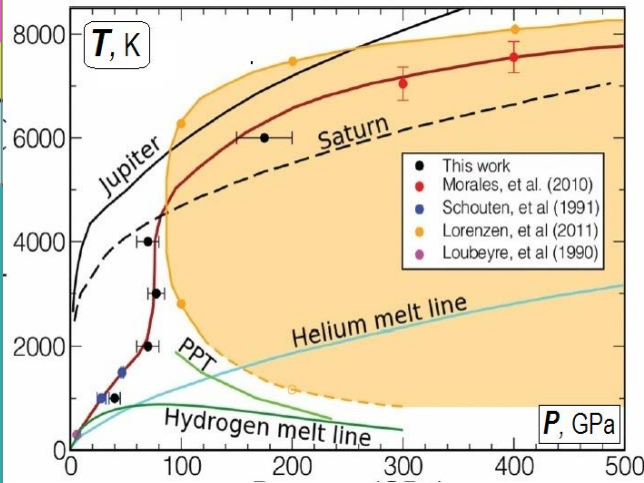
**Icy Uranus**

**(2017)**

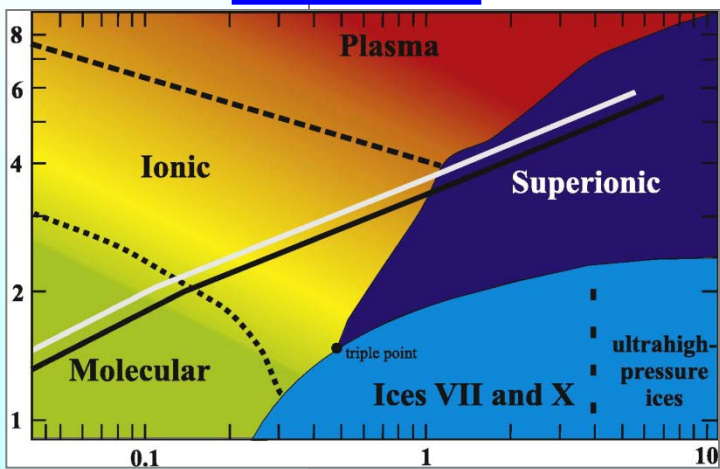


1 bar  
76 K

**H<sub>2</sub> + He**



**Water**



560 GPa  
~4000 K

**(5.6 Mbar)**

**Methane**  
**CH<sub>4</sub>**

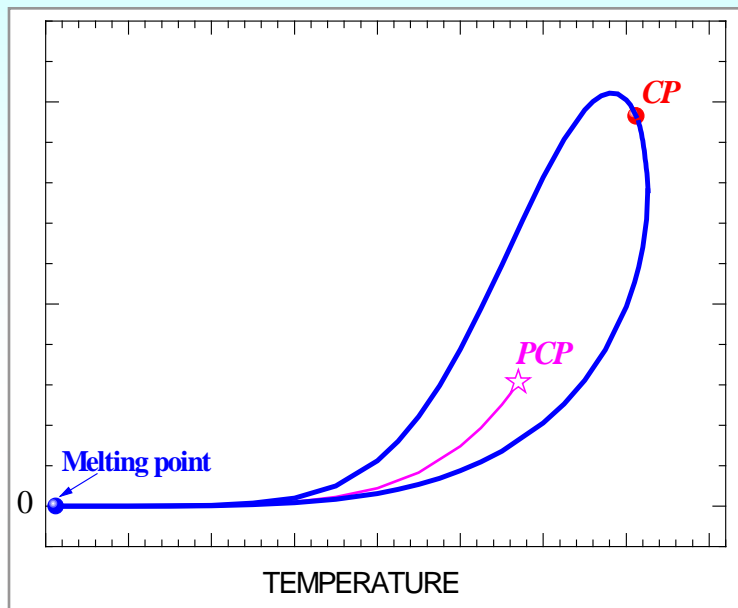
**?**

...yer E.R., Hamel S., Nettelmann N., Fr  
...ollins L.A., Kress J.D., Fortney J.J., R  
...he Linear Mixing Approximation //  
...nus structure model with three ho  
...al lines). The radial direction sca



# Неконгруэнтные фазовые переходы

Прошло ~ 20 лет...

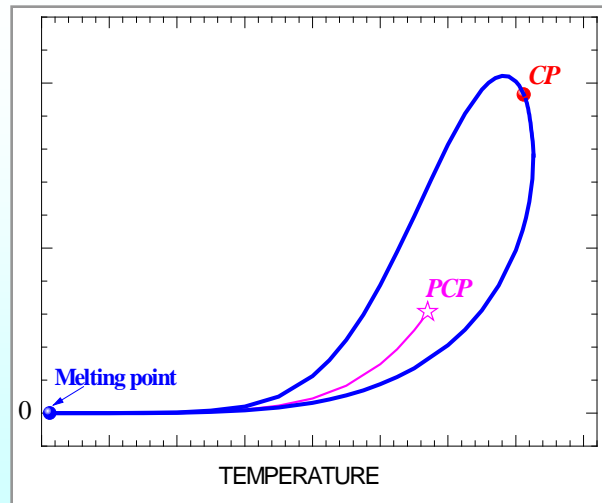


Весьма ограниченный прогресс в изучении неконгруэнтных фазовых переходов в сплавах, простых смесях и в продуктах высокотемпературного разложения компаундов (*оксидов, гидридов и др...*)

В планетарных гелий-водородных смесях активно изучается одна из разновидностей неконгруэнтных фазовых переходов – появление “зон несмесимости” гелия с водородом (*immiscibility*), но не прослеживается “сдвиг и уширение” диссоциативно-плазменного перехода liquid-liquid в водороде, азоте и др, уже ~ 15 лет предсказываемого в рамках первопринципных подходов (DFT-MD), при добавлении малых доз гелия.

“... даже в сплавах металлов ...”

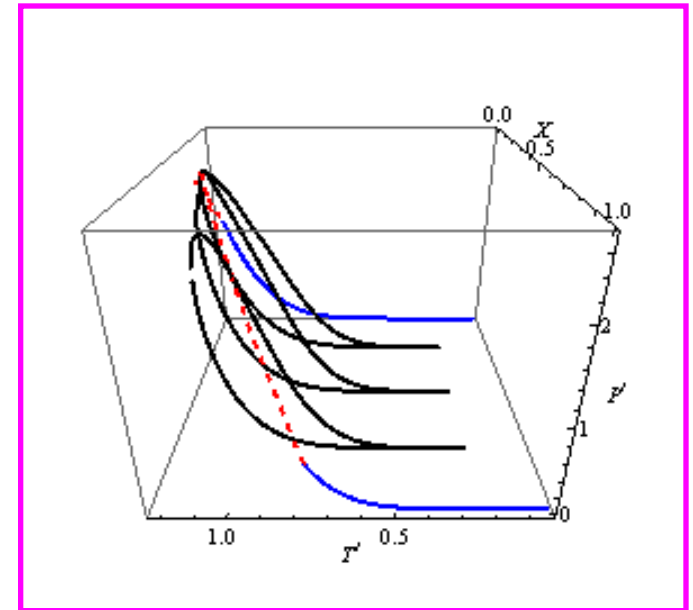
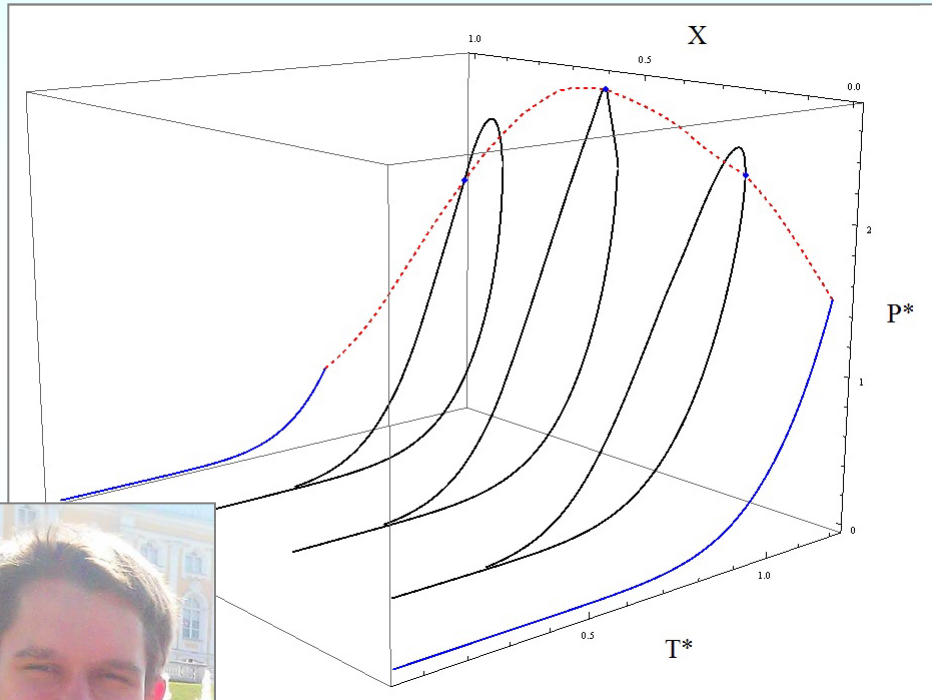
Сегодняшние  
Широкодиапазонные Уравнения Состояния  
и Первопринципное Прямое Моделирование  
пока не описывают **неконгруэнтный** характер  
перехода газ-жидкость  
**в сплавах металлов и в компаундах !**



2021

# Неконгруэнтное испарение в **модифицированной** модели “бинарной ионной смеси” { ВІМ(~) }

**Простейшая модель неконгруэнтного испарения в кулоновской системе**



[PNP-2015 \(Almaty\)](#) // **Никита Строев & И.Иосилевский (МФТИ, ОИВТРАН)**

*Study of Non-Congruent Phase Transition in Simple Coulomb Model*

N. Stroeov, I. Iosilevskiy, *Journal of Physics: Conference Series*, **774**, 012040 (2016)



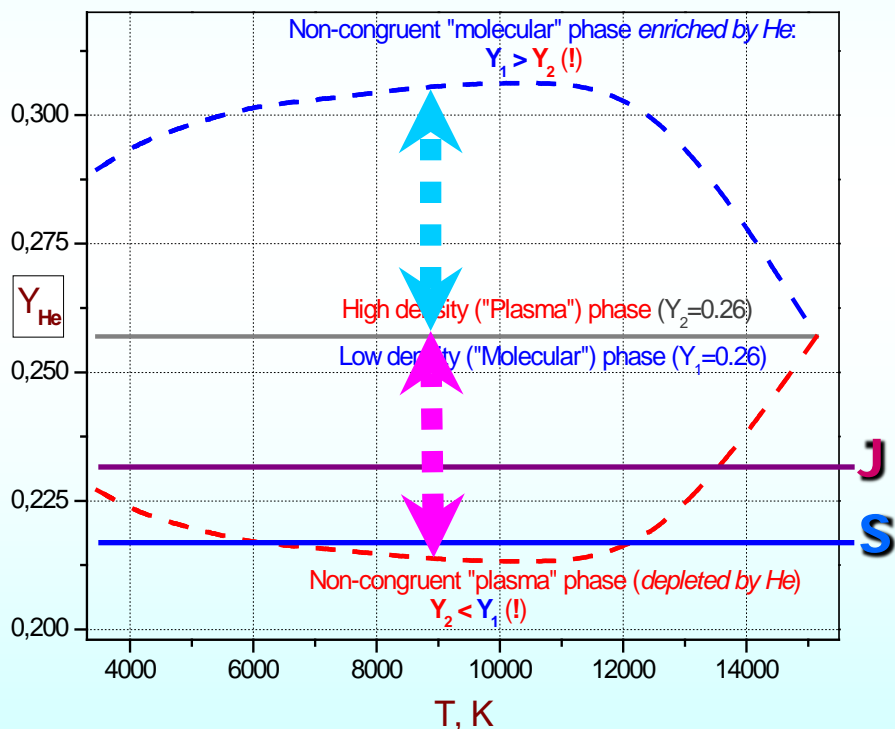
# Оценка неконгруэнтности плазменного фазового перехода в $H_2/He$ смеси в недрах планет-гигантов

In cooperation with

A. Ukrainets (MIPT)

Использован табулированный УРС с PPT в версии [Saumon, Chabrier and Van Horn (1995)]

**Неконгруэнтность может привести к заметному различию доли гелия в сосуществующих фазах гипотетического плазменного фазового перехода в недрах планет-гигантов !**



## Phase Separation in Giant Planets:

Jonathan J. FORTNEY, William B. HUBBARD  
*Icarus*, 164 (1) 2003

Atmospheric elemental abundances in Jupiter and Saturn  
 (mass fractions)

Element	SOLAR	JUPITER <i>Galileo</i>	SATURN <i>Voyager</i>	SATURN <b>revised</b>
H	0.736	0.742	0.92	0.76
He	0.249	0.231 ± 0.04	0.06 ± 0.05	0.215 ± 0.035

**А. Украинец, И. Иосилевский** / сб. "Физика вещества в экстремальных условиях", Ред. В.Фортон, Москва, ИПХФ РАН (2005) p.116. // сб. "Экстремальные состояния вещества. Ударные волны" (Харитоновские научные чтения) Саров, (2007) с. 248

# Заключение



# Исследования проблемы **Фазовых Переходов** **в Веществе Экстремальных Параметров**

Были в значительной мере инициированы  
Владимиром Евгеньевичем Фортовым

## Вехи

Отчет (1973) Альтшулер Л.В., Фортон В.Е. и др  
– Оценка Параметров Крит-точки Урана

ТВТ (1975) - Фортон В.Е. Леонтьев А.А., Дремин А.Н  
– Оценка Параметров Крит-точки Б-ва Металлов

PRL (2007) – Fortov V.E. Ilkaev R.I.,  
– Quasi-isentropic compression of deuterium plasmas

ЖЭТФ (2010-2021) – Мочалов М.А. Фортон В.Е. и др  
– Квазиизэнтропическое сжатие плазмы дейтерия  
до давлений 18 Мбар,...55 Мбар,... 200 Мбар...



*“Не говори с тоской – их нет,  
но с благодарностью – были!...”*



*Андрей Никонович Старостин и Владимир Евгеньевич Фортвов*

**Thank you!**

**Support: RAS Scientific Program “*Physics of Extreme States of Matter*”**