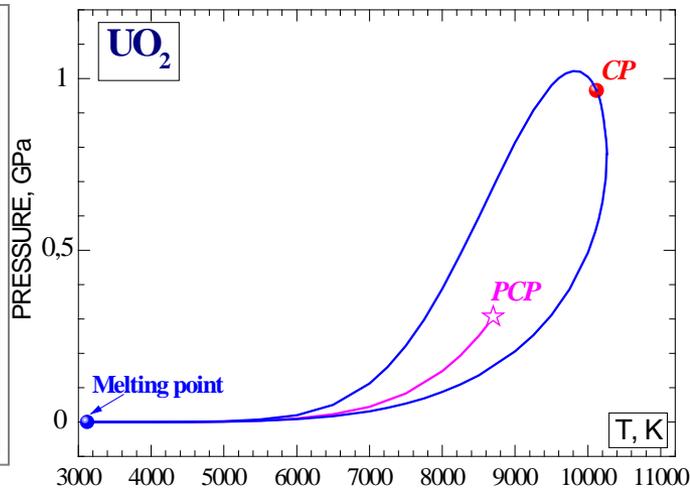
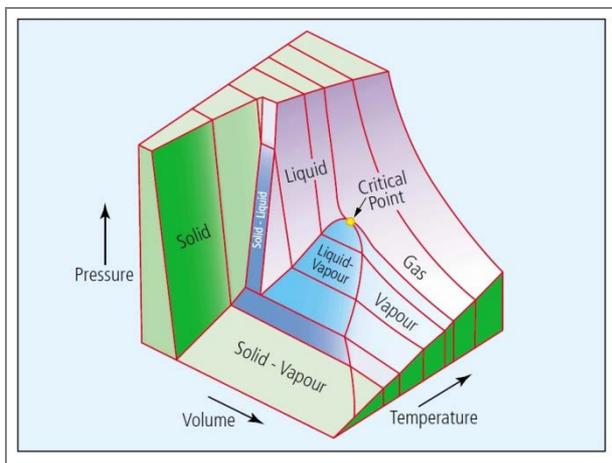


Неконгруэнтные фазовые переходы

в земных и космических приложениях



И.Л. Иосилевский, В.К. Грязнов

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



Неконгруэнтный фазовый переход

Неконгруэнтный (или *инконгруэнтный*) ФП -
- **это** когда сосуществующие фазы имеют
разный химический состав !

Актуально для всех систем
из *двух* (или более) *химических элементов!*

Например, в физике газовых планет:

- это смесь $\text{H}_2 + \text{He}$ с высокотемпературными
продуктами разложения H_2O , CH_4 , NH_3 , SiO_2 , Al_2O_3 ...

Например, в физике землеподобных планет:

- это смесь высокотемпературных продуктов
разложения - SiO_2 , Al_2O_3 , MgO , CaO ... *etc*

NB!! - Теплофизические Свойства

Термодинамика, перенос, оптика и фазовые превращения...

Смеси:

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

Давления:

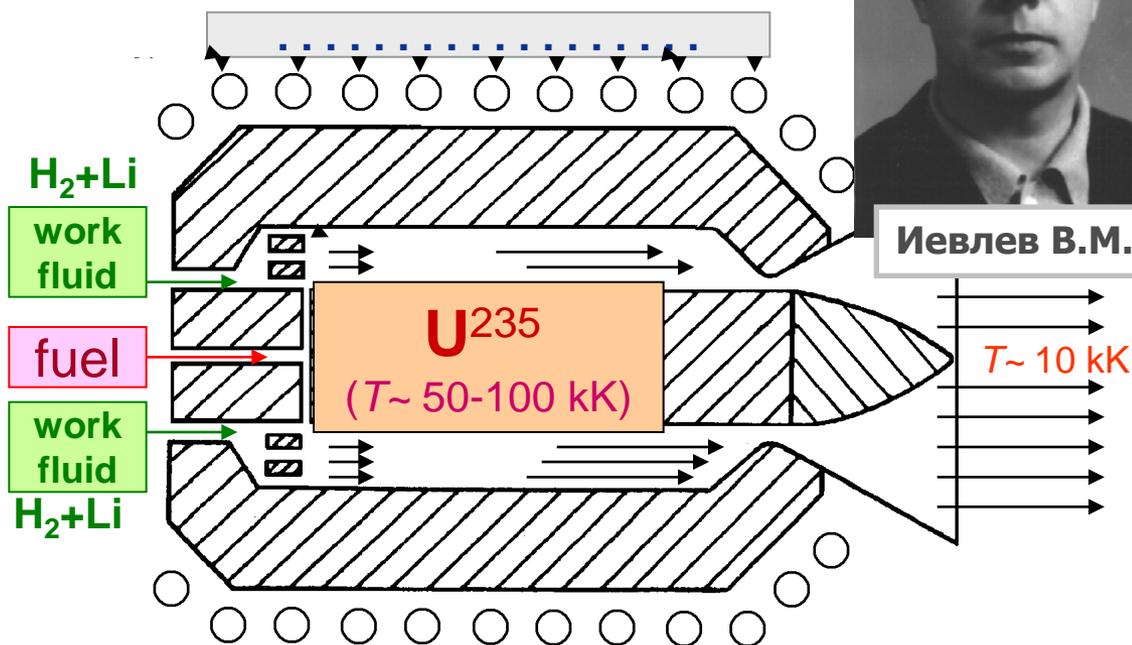
$P \sim 1 \leftrightarrow 1000$ бар

Температуры:

$T \sim 1 \leftrightarrow 100$ кК

Фазовые переходы

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



Иевлев В.М.

Высокотемпературный вариант ГФЯР

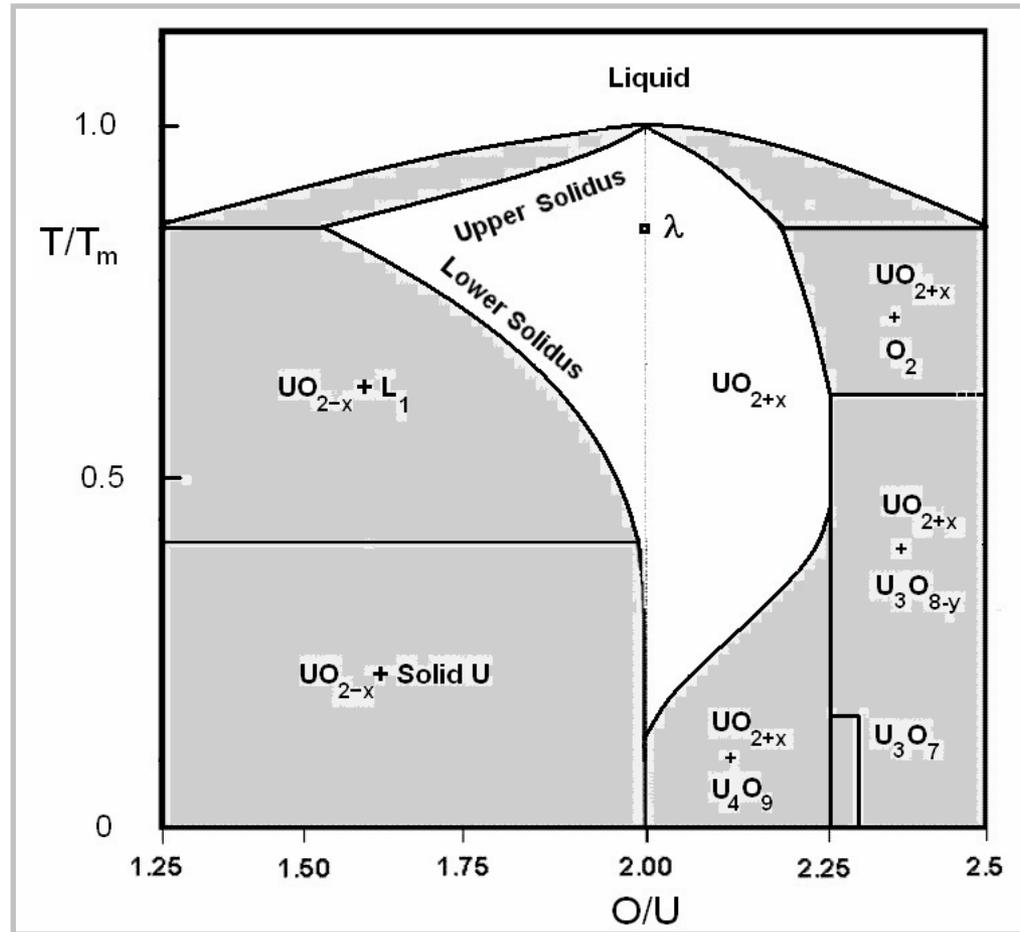
Иевлев В.М. Известия АН СССР (Энергетика) (1977)

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

NB! - Большинство фазовых переходов в газофазном ЯРД реализуется
в смесях из двух (и более) химических элементов **!!**

Неконгруэнтность фазовых переходов

жидкость – твердое тело ... **хорошо известна!**



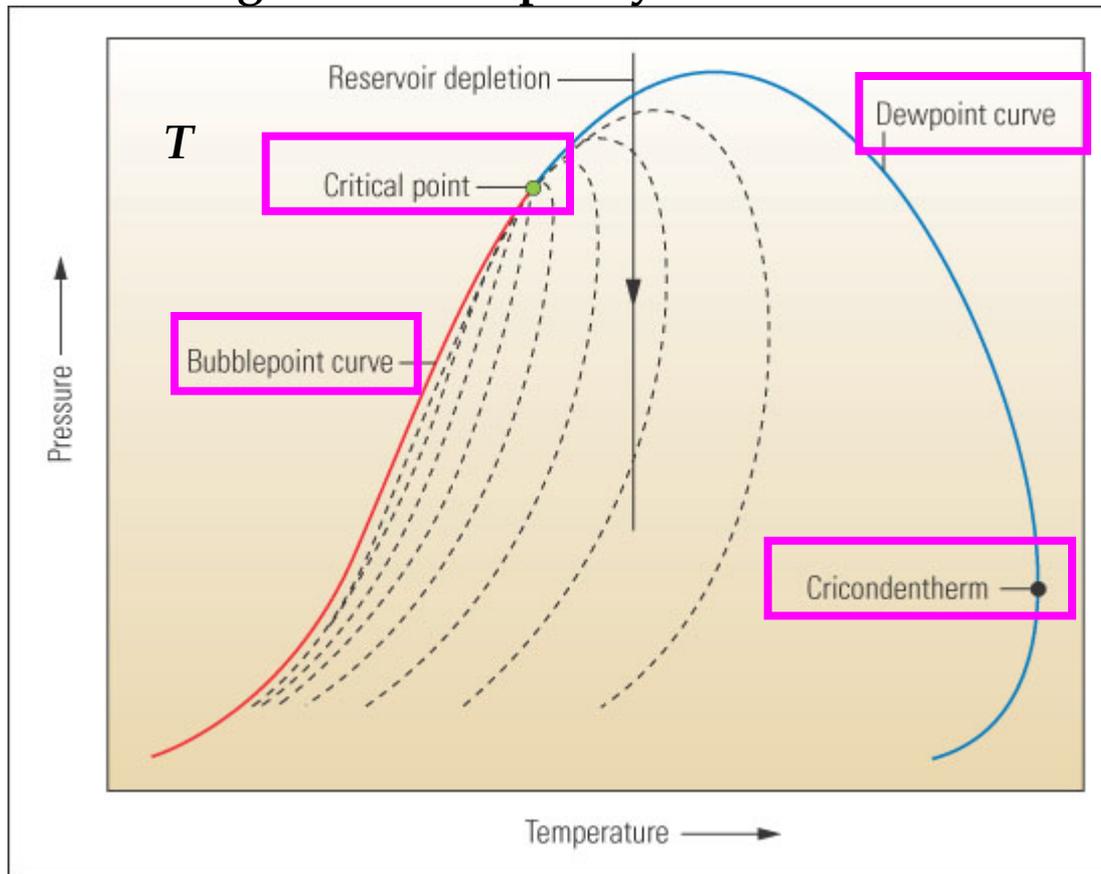
Например, фазовая диаграмма системы U + O

Неконгруэнтность фазовых переходов
флюид-флюид в простых не реагирующих смесях
углеводородов... **хорошо известна!**

r



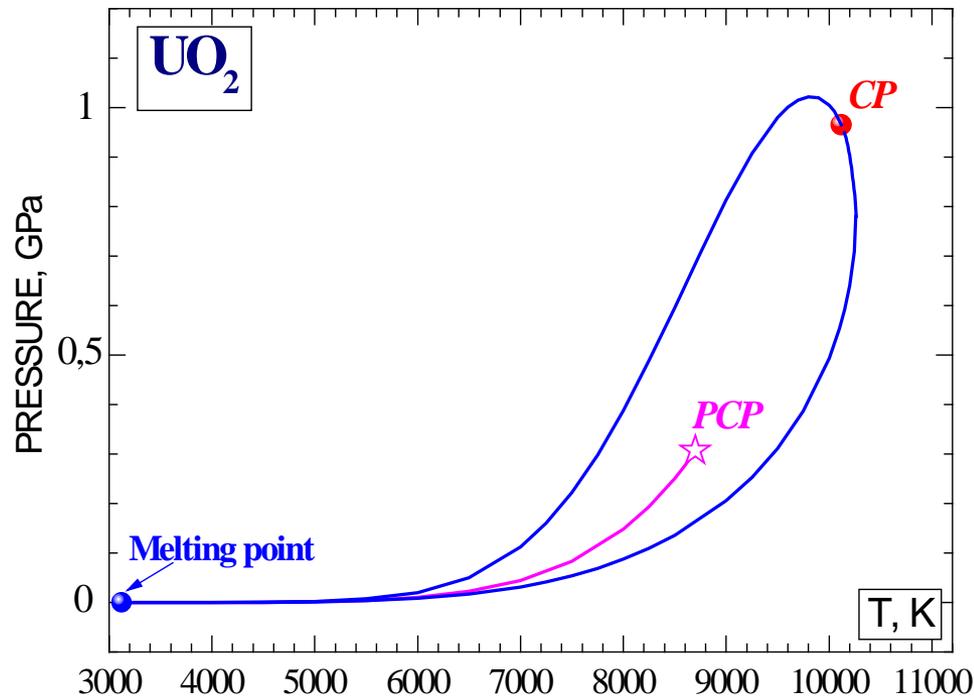
Phase diagram for simple hydrocarbons mixture



Нас прежде всего интересуют
Неконгруэнтные фазовые переходы

Флюид – Флюид

в продуктах высокотемпературного разложения
химических соединений (компаундов)

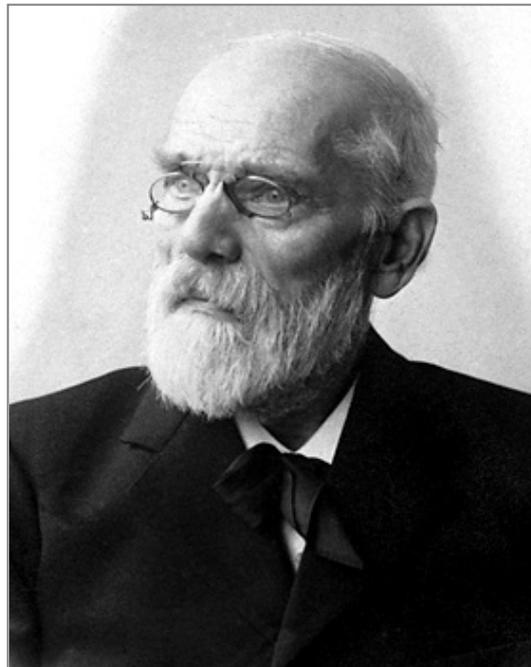


Пример:

Фазовая диаграмма испарения в системе U + O

NB!

**Неконгруэнтные фазовые переходы
флюид – флюид существенно отличаются
свойствами и структурой от “обычных”
переходов ван дер Ваальса**



Термодинамика неконгруэнтных фазовых переходов

Двухфазная область в интенсивных переменных (P - T , μ - T , μ - P)

Граница двухфазной области неконгруэнтного фазового перехода в P - T , μ - T и μ - 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: $(O/U)_{\text{liquid}} = (O/U)_{\text{vapor}}$ и $\{ \partial \mu_i / \partial n_k \}_T \text{CP} = 0$

Динамика неконгруэнтных фазовых переходов:

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

1995 – 2002

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

**“ Уравнение состояния и неконгруэнтное
испарение диоксида урана ”**

Инициатор и координатор проекта - В.Е.Фортов

Владимир Фортов



23.01.1946

29.11.2020

Посвящается Памяти В.Е. Фортова

Расчет неконгруэнтного испарения
в продуктах экстремального нагрева диоксида урана

Две стадии

**– Разработка модели Уравнения Состояния
газо-плазменного и жидко-плазменного состояния
системы Уран - Кислород**

– Расчет параметров фазового равновесия

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

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

Уравнение состояния и неконгруэнтное испарение диоксида урана

Евгений Якуб



Игорь Иосилевский (Россия)
Виктор Грязнов (=“=)
Евгений Якуб (Украина)
Александр Семенов (Россия)
Владимир Юнгман (=“=)
Лев Горохов (=“=)
Игорь Ломоносов (=“=)
Михаил Шейндлин (=“=)
Михаил Брыкин (=“=)
Андрей Башарин (=“=)
Михаил Баско (=“=)
Михаил Жерноклетов (=“=)
Михаил Мочалов (=“=)
Александр Медведев (=“=)
Темур Салехов (Узбекистан)

Claudio Ronchi (JRC, Karlsruhe)
Gerard J. Hyland (Warwick, UK)

Координация и руководство

Владимир Фортов (Россия)
Claudio Ronchi (Germany)
Gerard J. Hyland (UK)
Борис Шарков (Россия)

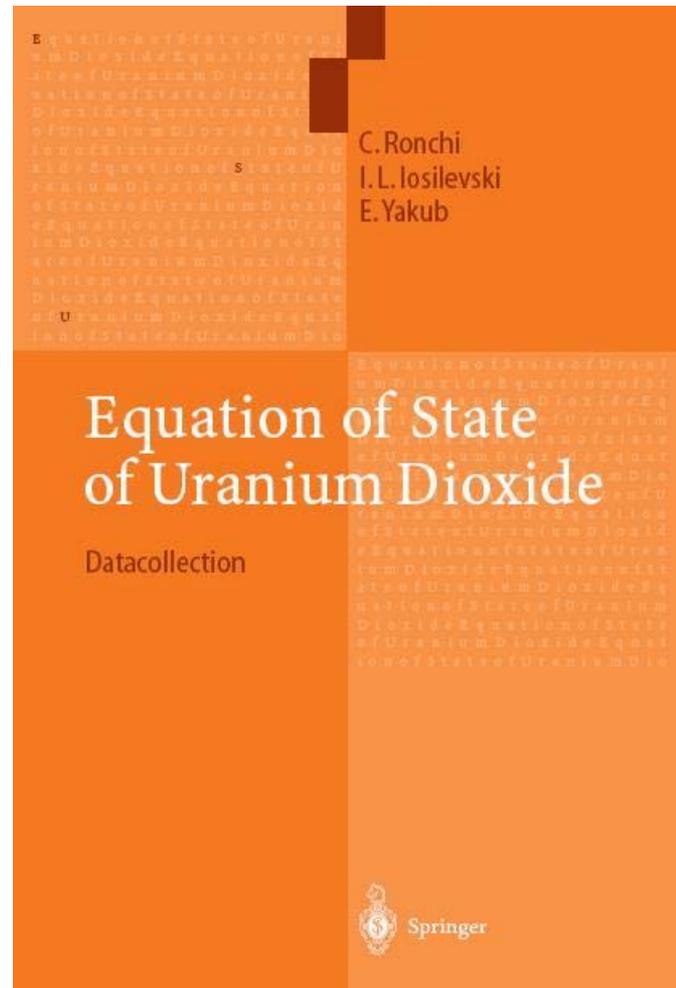


Виктор Грязнов

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

MIPT Research & Educational Center
“High Energy Density Physics”

Уравнение Состояния Диоксида Урана

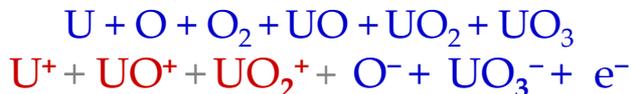


Ronchi C., Iosilevskiy I., Yakub E. // Equation of State of Uranium Dioxide
Springer, Berlin (2004)

Модель уравнения состояния (“Химическая модель плазмы”)

Ионно-молекулярная модель состава

(и для жидкой и для газовой фаз)

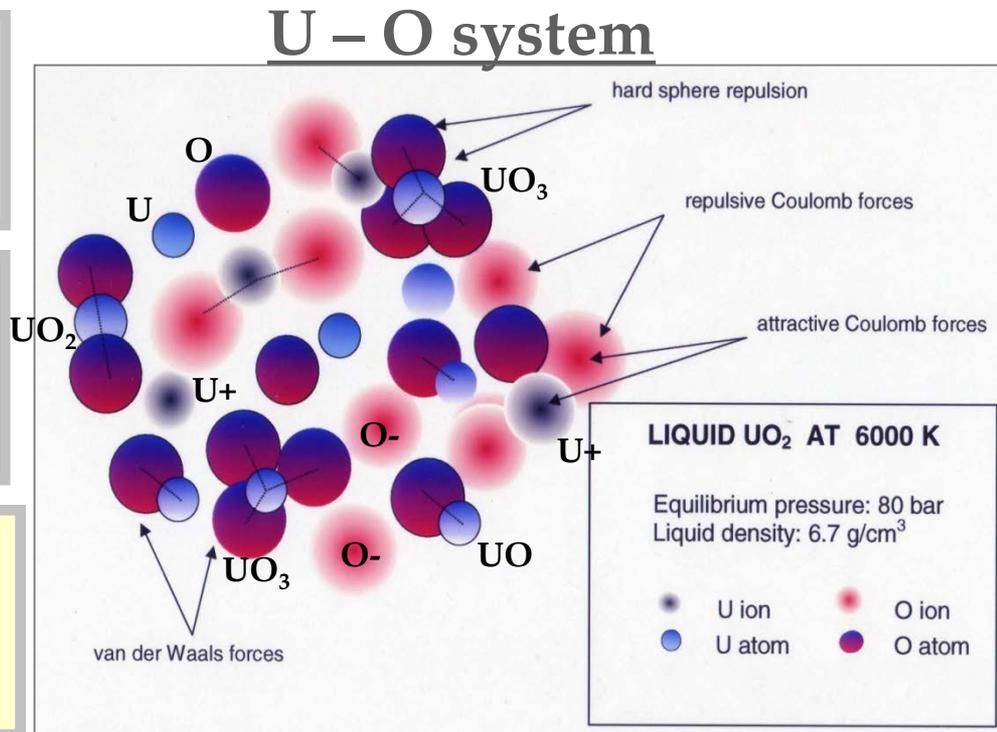


Эффективное взаимодействие частиц:

- 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



- 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, (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., // *Известия РАН (Энергетика)*, N 5, 115 (2011)

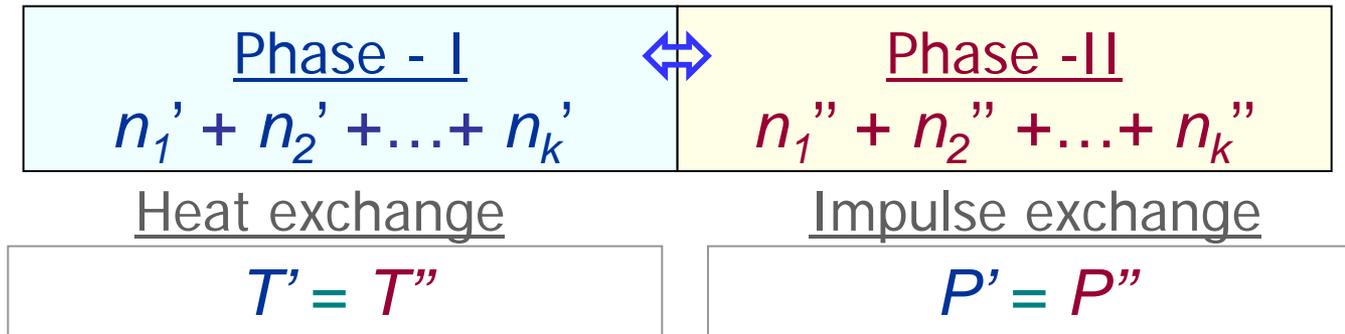
Расчет неконгруэнтного испарения
в продуктах экстремального нагрева диоксида урана

Две стадии

Разработка модели Уравнения Состояния
газо-плазменной и жидко-плазменной фаз

Расчет параметров фазового равновесия

Phase equilibrium in chemically reacting systems (Gibbs conditions)



Particle Exchange
neutral species
(Gibbs conditions)

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

Equilibrium reactions

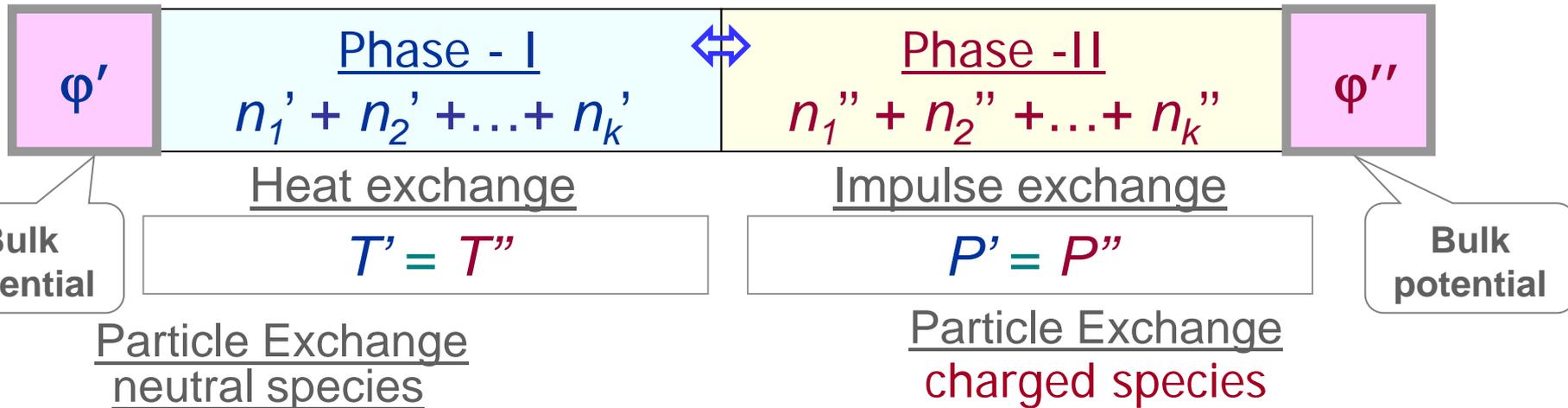


(reduce number of basic units!)

Uranium – Oxygen system

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

Phase equilibrium in reacting **Coulomb** system (Gibbs – Guggenheim conditions)



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

Electro-chemical potentials are equal !

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

Potential drop at mean-phase interface in equilibrium Coulomb systems

$$\mu_1'(P, T, x') = \mu_1''(P, T, x'') + Z_1 e \Delta\phi(T)$$

$$\mu_2'(P, T, x') = \mu_2''(P, T, x'') + Z_2 e \Delta\phi(T)$$

$$\mu_e'(P, T, x') = \mu_e''(P, T, x'') - e \Delta\phi(T)$$

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

Equilibrium reactions



(reduced number of basic units)

Uranium – Oxygen system

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

see for example : Iosilevskiy I., *Encyclopedia on Low-T Plasmas*. III-1 (Suppl) 2004

Iosilevskiy I., *Acta Physica Polonica B*, 3, 589 (2010)

Принудительно-конгруэнтное испарение в U-O системе

Фазовое равновесие согласно условиям Максвелла («равных площадей»)

Диаграмма давление - плотность

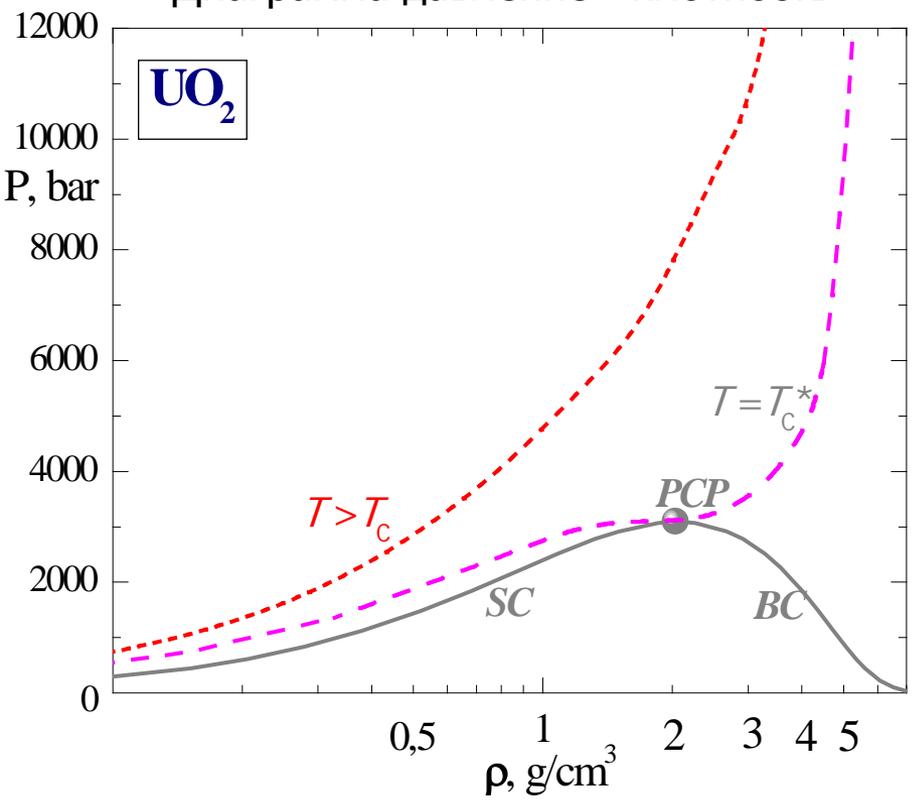
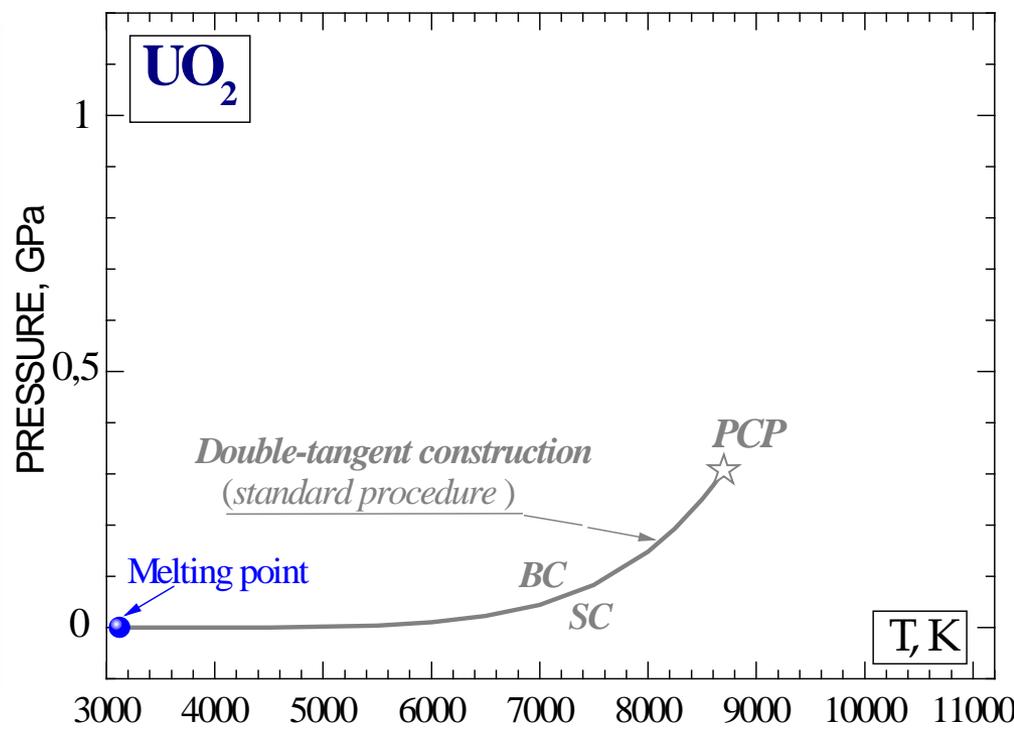


Диаграмма давление - температура



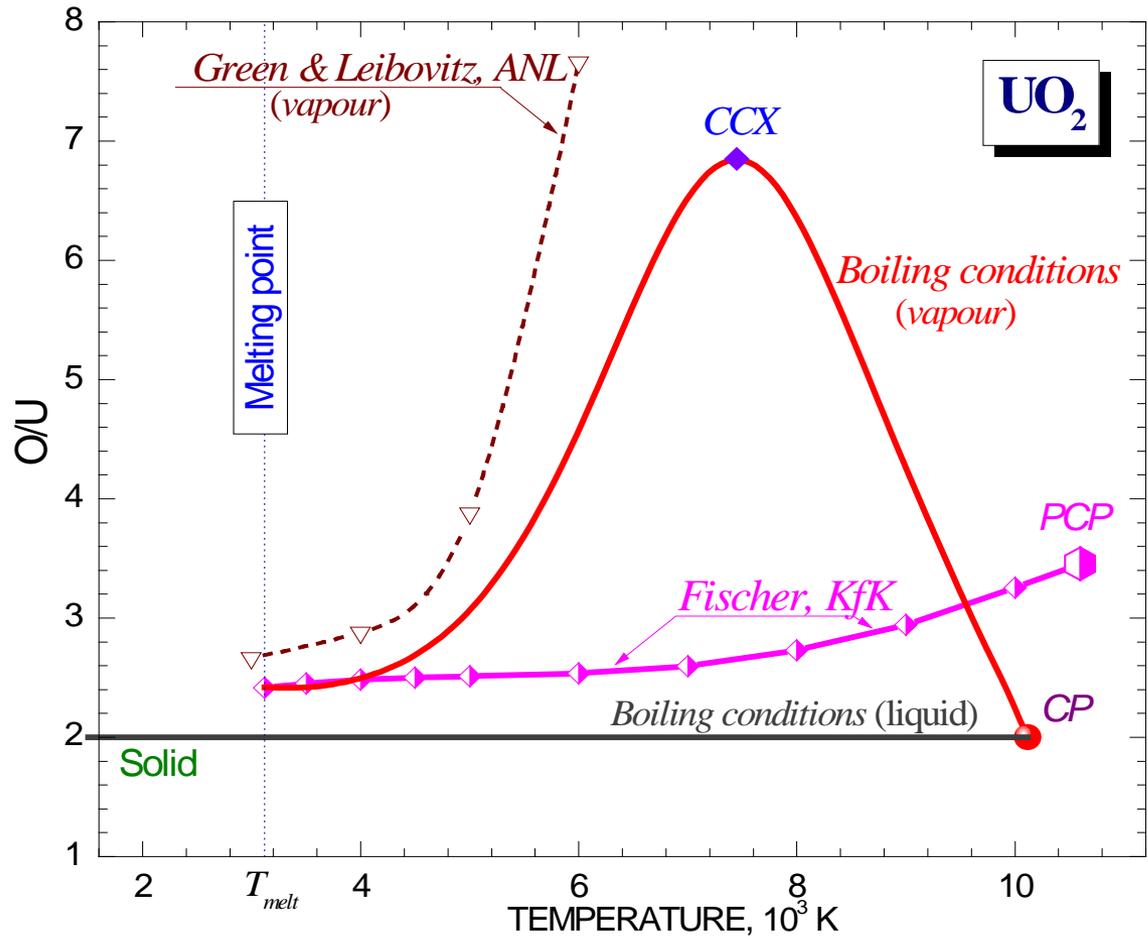
– Принудительно-конгруэнтное равновесие

BC – Граница кипения жидкости
SC – Граница насыщения пара

- Stoichiometries of coexisting phases are **forcedly** equal: $x' = x''$!
- Partial phase equilibrium conditions for mixture is valid in form of the “Double Tangent Construction” for Van der Waals “loops” :

$$P' = P'' \quad \parallel \quad T' = T'' \quad \parallel \quad g'(P,T, x') = g''(P,T, x'') \quad (g = \text{specific Gibbs free energy})$$

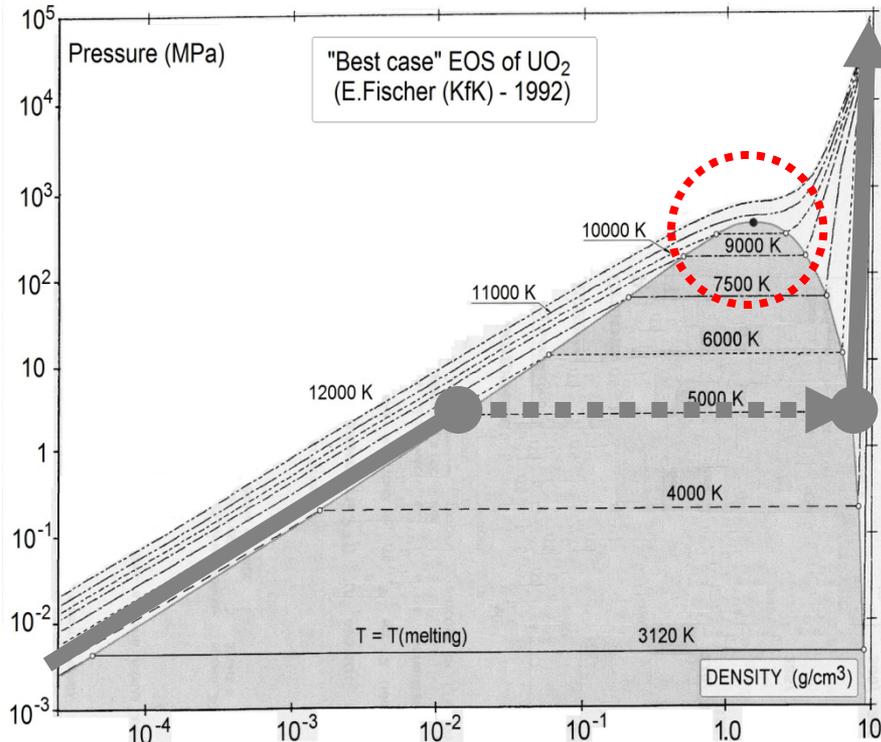
Кислородное обогащение паров над кипящим $\text{UO}_{2.0}$



NB! Очень **высокое** кислородное обогащение паров над кипящим $\text{UO}_{2.0}$

Ход изотерм в двухфазной области

Стандартная диаграмма давление-плотность

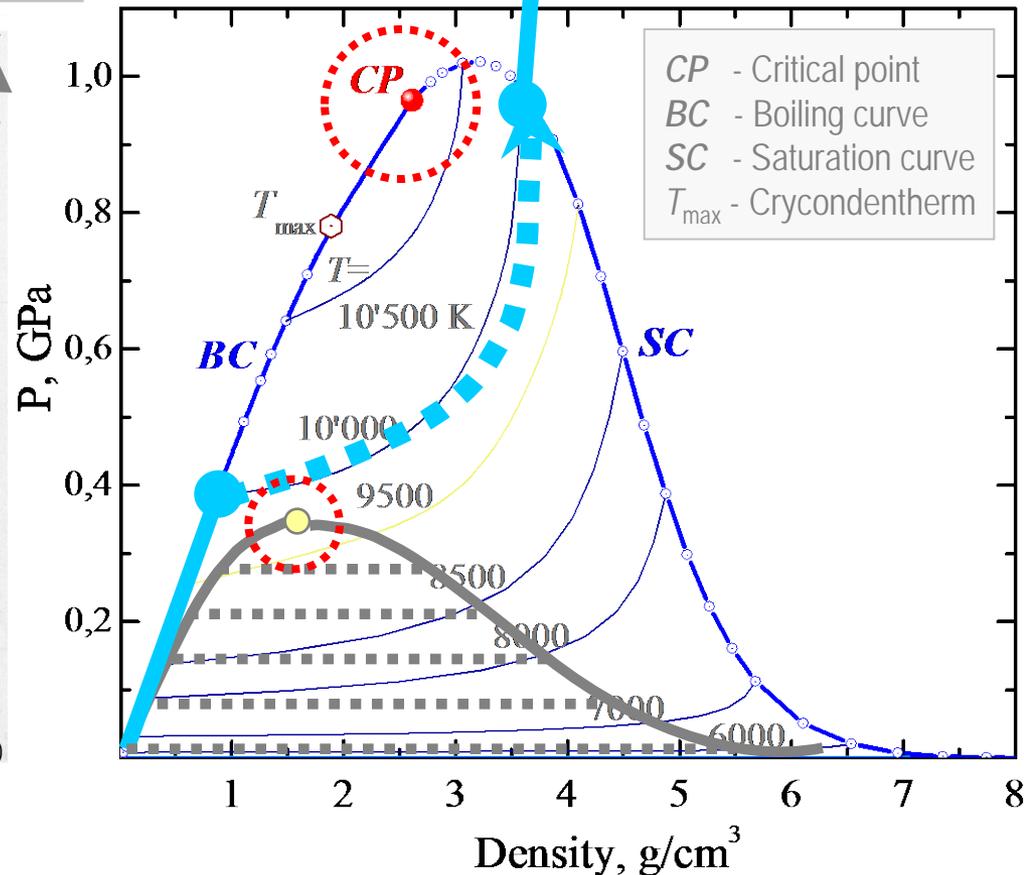


Fischer E., *J. Nucl. Sci. Eng.* (1992)

JRC. Karlsruhe.

NB!

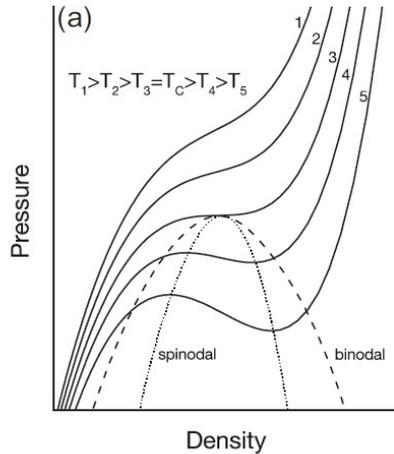
Неконгруэнтное испарение



Изотермический фазовый переход начинается и заканчивается при *разных* давлениях

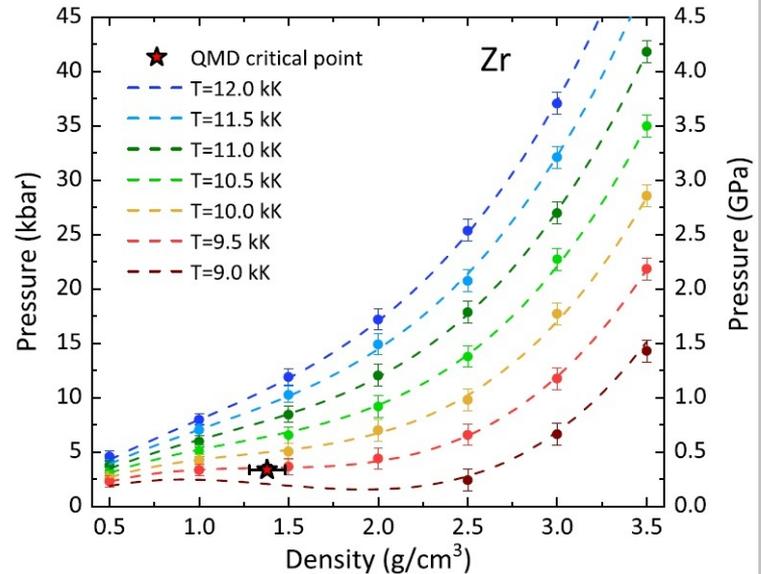
Изобарический фазовый переход начинается и заканчивается при *разных* температурах

Традиционный способ нахождения критической точки с использованием теоретического уравнения состояния



Paramonov M.A., Minakov D.V., Dorovatovsky A.V., Sheindlin M.A.,
Fokin V.B., Demyanov G.S., Levashov P.R.,
Phys. Rev. B **110**, (2024)

Illustration of schematic phase diagrams showing the method of successive approach (a) to the critical isotherm in the P - ρ plane



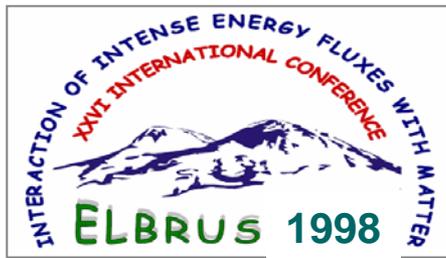
Paramonov M.A., Minakov D.V., Dorovatovsky A.V., Sheindlin M.A.,
Fokin V.B., Demyanov G.S., Levashov P.R.,
Phys. Rev. B **110**, (2024)

Расчет сетки изотерм и нахождение критической точки

$$(\partial P / \partial V)_T = 0 \quad (\partial^2 P / \partial V^2)_T = 0$$

NB! Не поможет при поиске критической точки неконгруэнтного фазового перехода

$$(\partial P / \partial V)_T \neq 0 \quad (\partial^2 P / \partial V^2)_T \neq 0$$



Необычные свойства неконгруэнтного испарения в высокотемпературной системе Уран – Кислород докладывались ~ 25 лет назад на “Эльбрусе”...

... И были восприняты сообществом с большим недоверием...

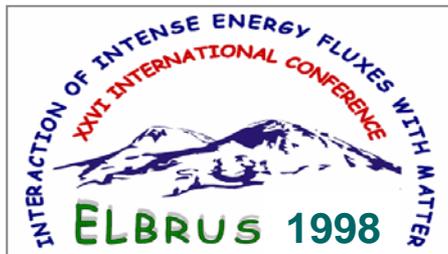
Среди множества вопросов были два главных ...

Если свойства ФП газ-жидкость так радикально изменились при переходе к системе из двух химических элементов, то каковы будут изменения при переходе к ФП в системе из трех-... четырех-... и более элементов ?

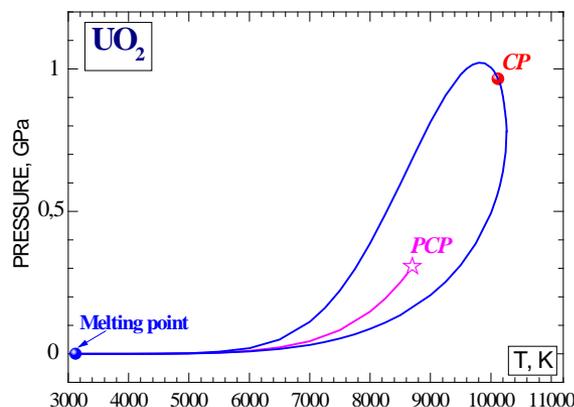
1

Неконгруэнтный фазовый переход в системе Уран – Кислород – это **Правило или **Исключение** ?**

2



Неконгруэнтный фазовый переход в продуктах нагрева диоксида урана



1998 г

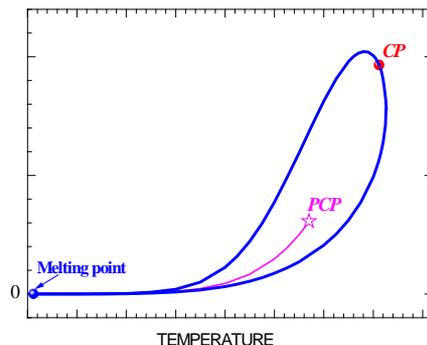
**Иосилевский И.Л., Грязнов В.К., Якуб Е.С., Семенов А.М.
Фортов В.Е. Ronchi C., Nyland J.**

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



Неконгруэнтность радикально меняет фазовые диаграммы в 2-D системах (напр. UO_2) в сравнении с переходами в 1-D системах (т.е. напр. в чистом уране и др...)

1



А какие изменения можно ожидать при переходе к фазовым превращениям в 3-D системах?... 4-D ? ...5-D ?... и т.д.
... или даже с **бесконечным количеством сортов ?...**

?

Системы 3-D... 4-D ...5-D ?... и т.д. – актуальны:

- напр. $\text{H}_2 + \text{He} + \text{H}_2\text{O} + \text{NH}_3 + \text{CH}_4 + \dots$ (Недра планет)
- напр. $\text{SiO}_2 + \text{FeO} + \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{CaO} + \dots$ (== «» ==)

(2017)

Неконгруэнтность в “ледяных” планетах ?

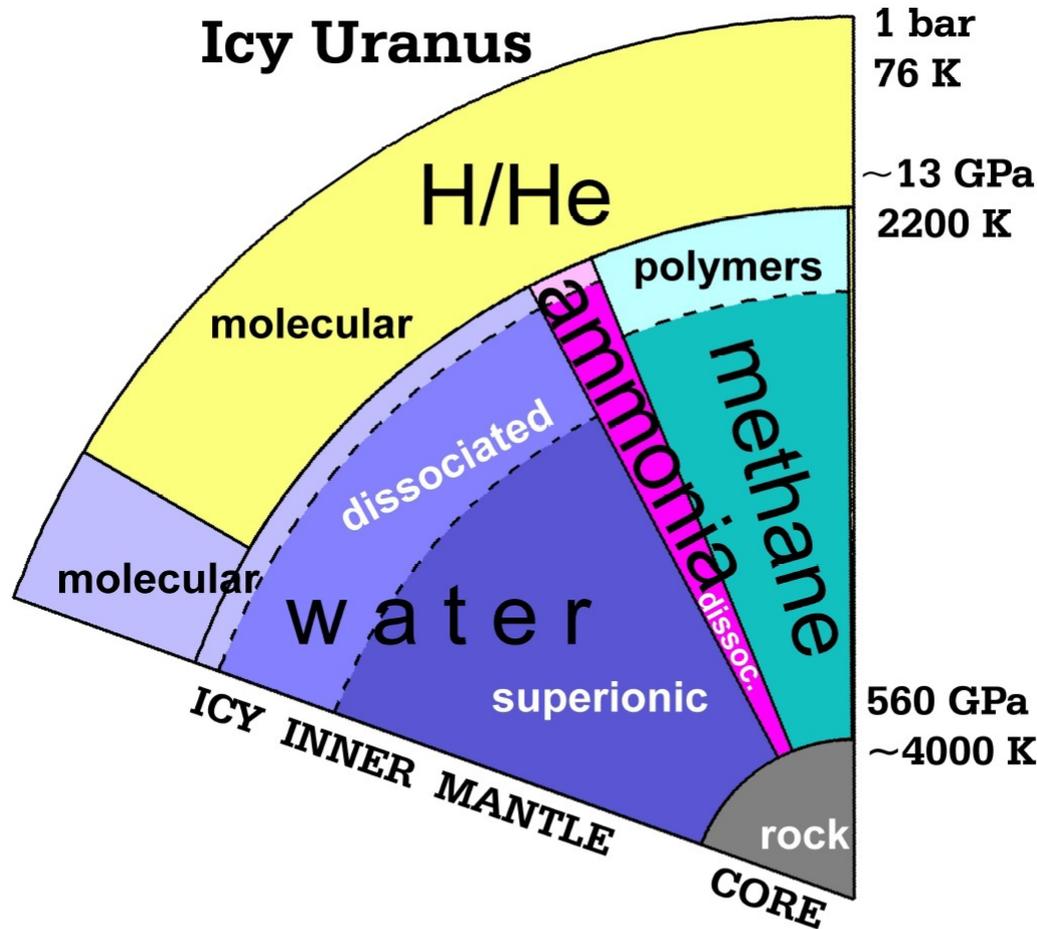
H₂+He

Water

Methane
CH₄

Ammonia
NH₃

?



(5.6 Mbar)

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

Утверждение

Фазовая диаграмма в **интенсивных переменных** (P - T , μ - T ...) в 3-D... 4-D... 5-D... и даже в бесконечномерных системах ... та же по структуре, что и в 2-D !

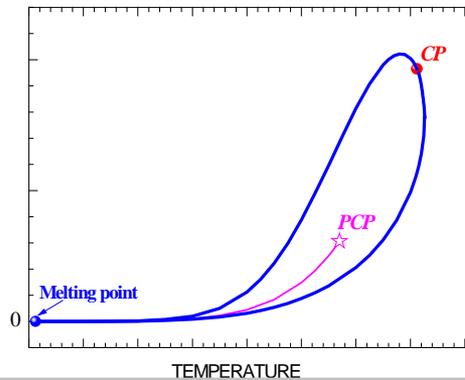


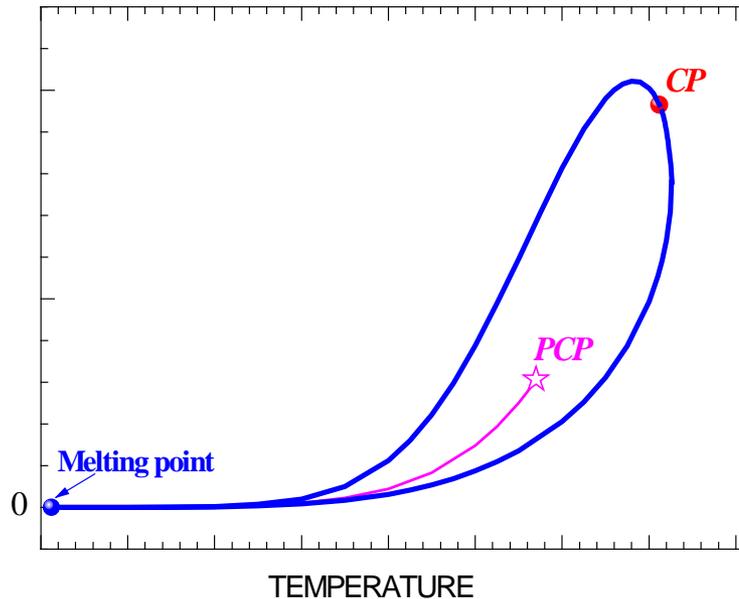
Диаграмма P - T – “Banana-like” structure
Диаграмма V - T , ρ - T – “Уширение” двухфазной зоны...
Пересечение двухфазной зоны – как в U-O системе...
Критическая точка в P - V - T – как в U-O системе...
(*T.e.* – не ван дер Ваальсова!)

2

Неконгруэнтный фазовый переход в системе уран – кислород

?

Правило *или* исключение



Общее правило:

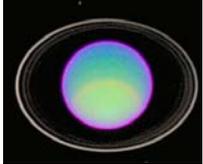
Любой фазовый переход в системе из **двух** и **более** химических элементов в общем случае **должен быть неконгруэнтным !**

Исключение:

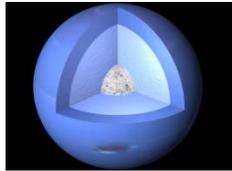
Фазовые переходы в химических соединениях, сохраняющих **моно-молекулярную структуру**, например, **H₂O, CO₂, NH₃ ... etc**, при **“комнатных температурах” !**

NB !!

Фазовые переходы в тех же компаундах в условиях, соответствующих **недрам планет**, **должны быть неконгруэнтными !**

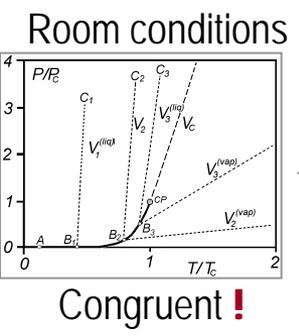
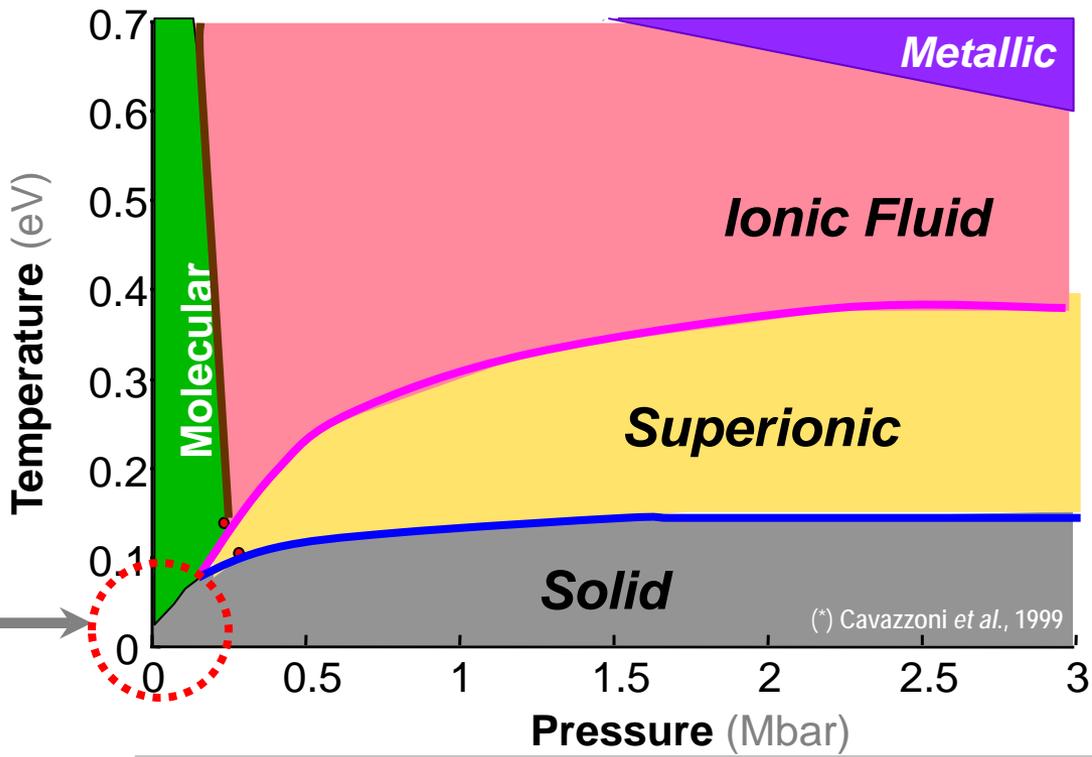


Water phase diagram



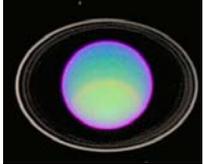
Uranus, Neptune and “hot-water” extrasolar planets

1999

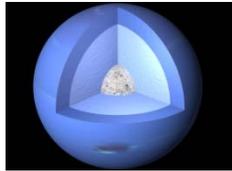


Ab initio calculations: - Cavazzoni, et. al. *Science* (1999)

Mattsson & Desjarlais (Sandia Lab.): *High energy-density water: DFT/QMD* (2007)
Morales M. et al. *PRE*, 81 (2010) // Lorenzen W., et al. *PRB*, 82 (2010)



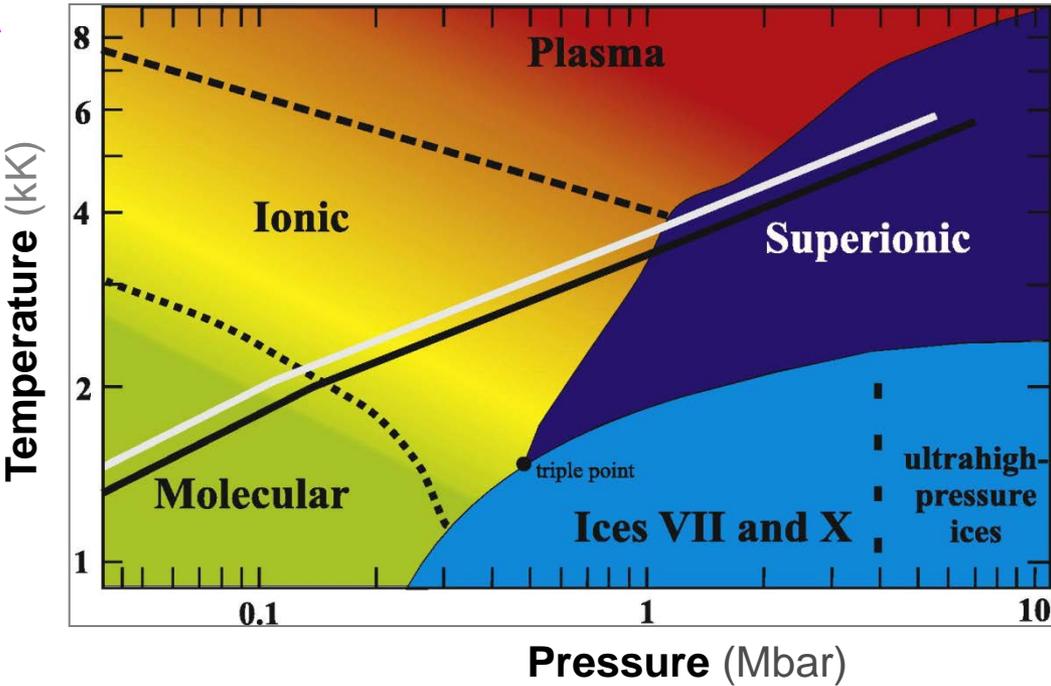
Water phase diagram



Neptune and “hot-water” extrasolar planets

2011

Water (phase diagram - 2011)



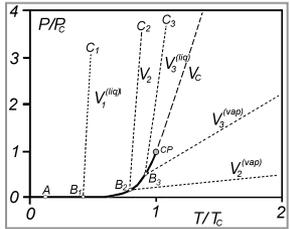
NB !

Structure of water phase diagram do not change in new calculations!

...

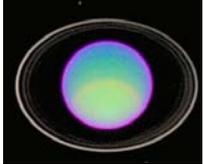
Its parameters could change !

...

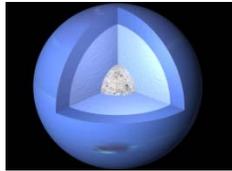


Ab initio calculations

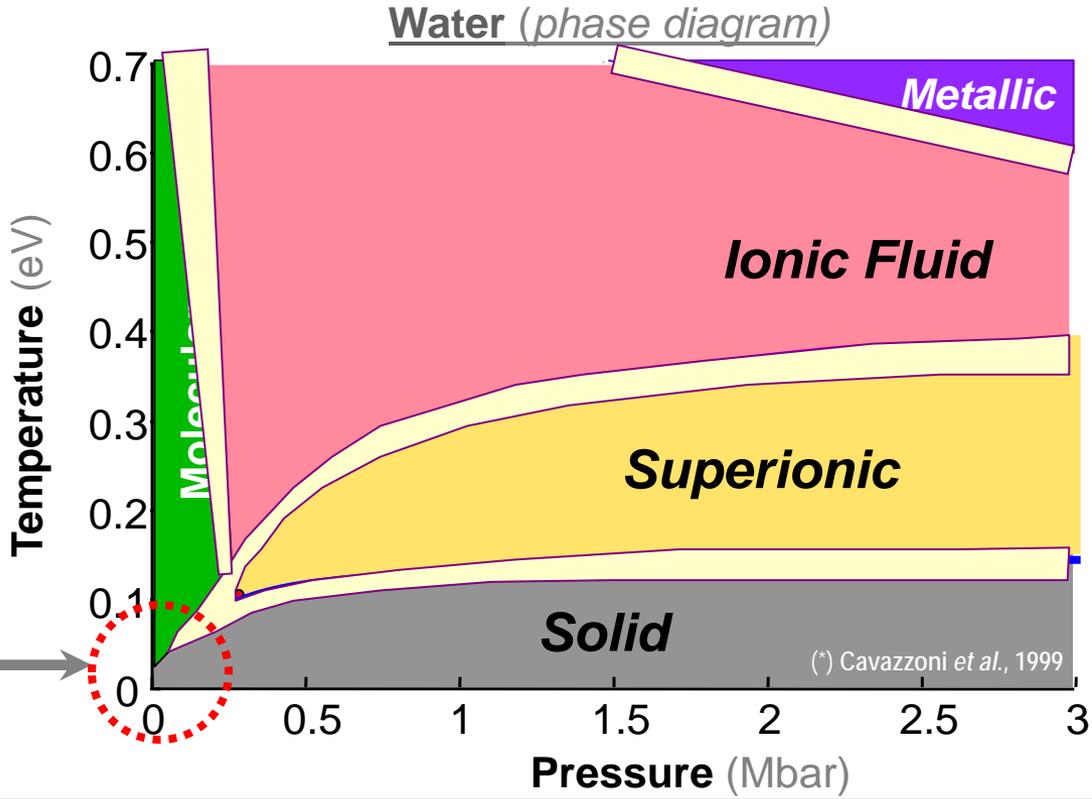
R.Redmer, T.Mattsson, N.Nettelman, M.French, *Icarus* (2011)



Water phase diagram

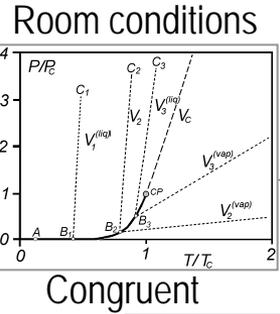


Uranus, Neptune and “hot-water” extrasolar planets



NB !

We don't know yet parameters of non-congruency for all (2D!) phase boundaries (if any) in water for planetary conditions !

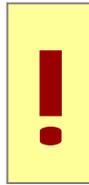


Ab initio calculations

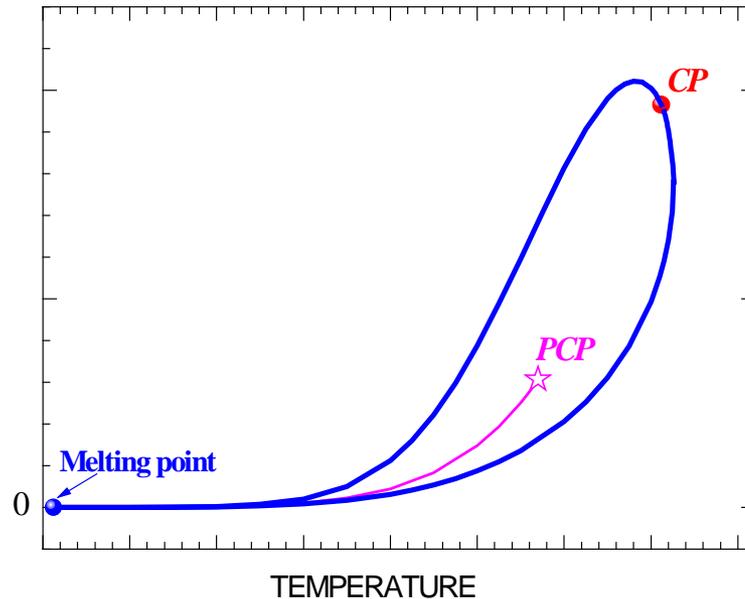
Cavazzoni, et. al. Science (1999) // Mattsson & Desjarlais (Sandia Lab.): High energy-density water: DFT/QMD simulations (2007) Morales M. et al. PRE, 81 (2010) // Lorensen W., et al. PRB, 82 (2010)

Any phase transition in *high-T_high-P* water must be *non-congruent*

Неконгруэнтные фазовые переходы



Это общее правило

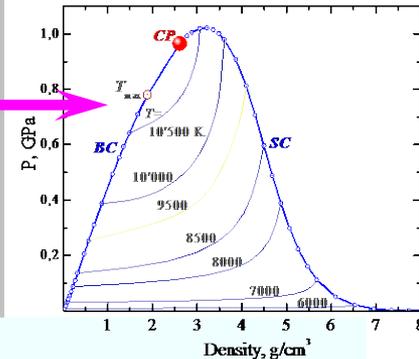
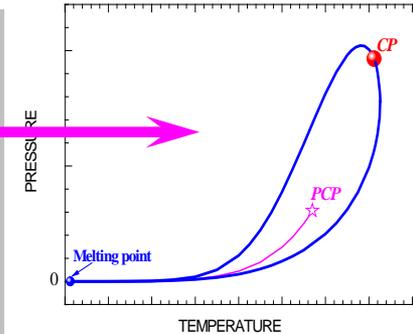


Hypothetical non-congruent phase transitions

(**NB!** *Very many candidates*)

Terrestrial applications:

- *Uranium- and Plutonium-bearing compounds (fuels):*
 - UO_2 , PuO_2 , $(Pu+U)O_2$, UC , UN , UF_6 ... etc.,
- *Metallic alloys:* (K-Na,... Pb-Bi... Al-Li... etc.)
- *Oxides:* (SiO_2 , MgO , Al_2O_3 ,...etc.)
- *Hydrides of metals* (LiH (DH)... etc.)
- *Ionic liquids and molten salts:*
 - *alkali halides* ($NaCl$,... CsF ,... etc.)
- *"Dusty" and Colloid plasmas:*
(Coulomb systems of macro-ions $Z_1 + Z_2$, and micro-ions: $+1, -1$)

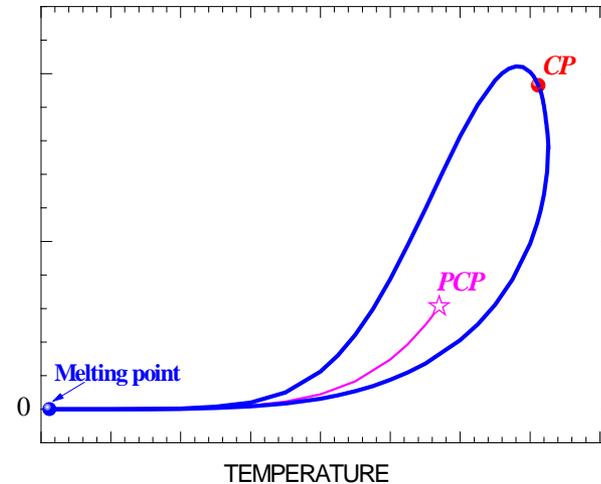


Non-Congruence in Cosmic Matter:

- *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*
- *Phase Transitions in Neutron Stars*
- *Phase Transitions in "Strange" Stars* (quark-hadron transition ... etc.)

Неконгруэнтный фазовый переход

общее правило!



Сплавы металлов

(*K-Na, ... Pb-Bi, ... Al-Li, ... etc.*)

Неконгруэнтное испарение в модифицированной модели “бинарной ионной смеси” { BIM(~) }

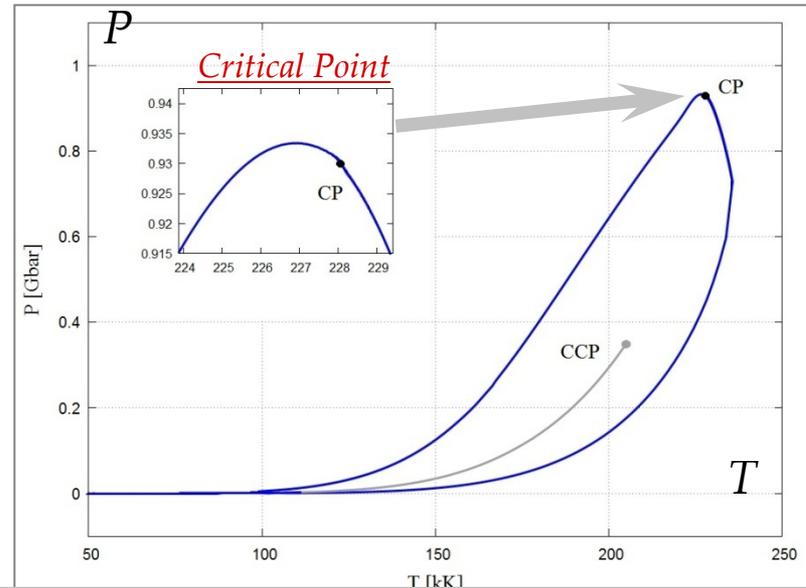
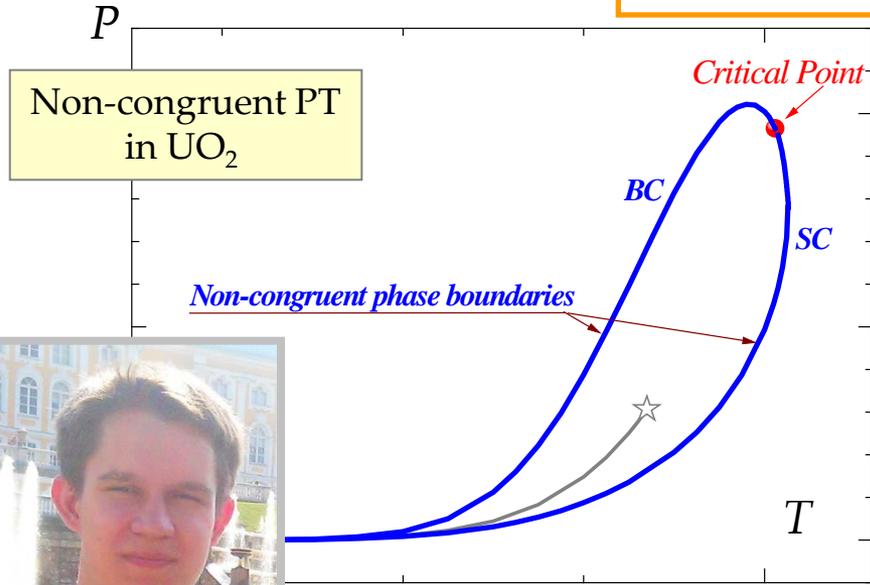
BIM(~) – Смесь классических ионов Z_1 и Z_2 на однородно-сжимаемом компенсирующем “фоне” ферми-газа электронов

$$F(N_1, N_2, N_e, V, T) = F_e^{(id)} + F_i^{(id)} + F_{ee}^{(ex)} + F_{ii}^{(ex)}$$

$$n_e = n_1 Z_1 + n_2 Z_2$$

Аппроксимации для F_{ii}, F_{ee}, F_{ei} согласно [A. Potekhin, J. Chabrier / *PRE* 58 (1998)]

“Linear Mixing Rule” – (LM)

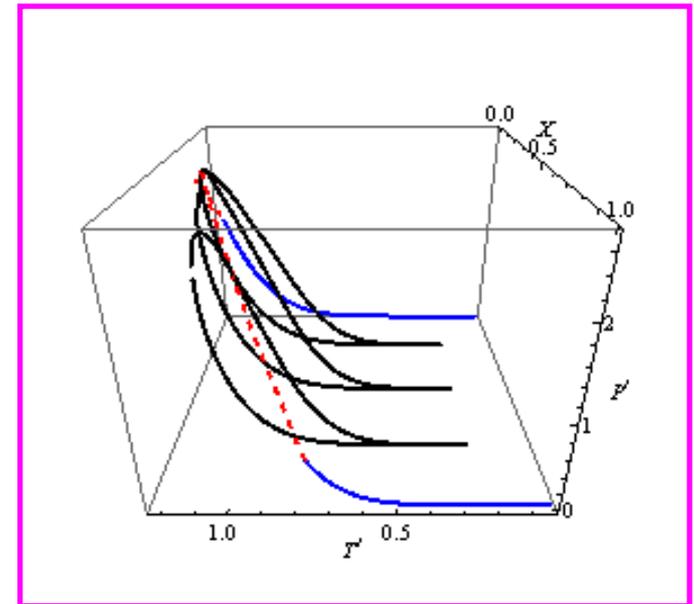
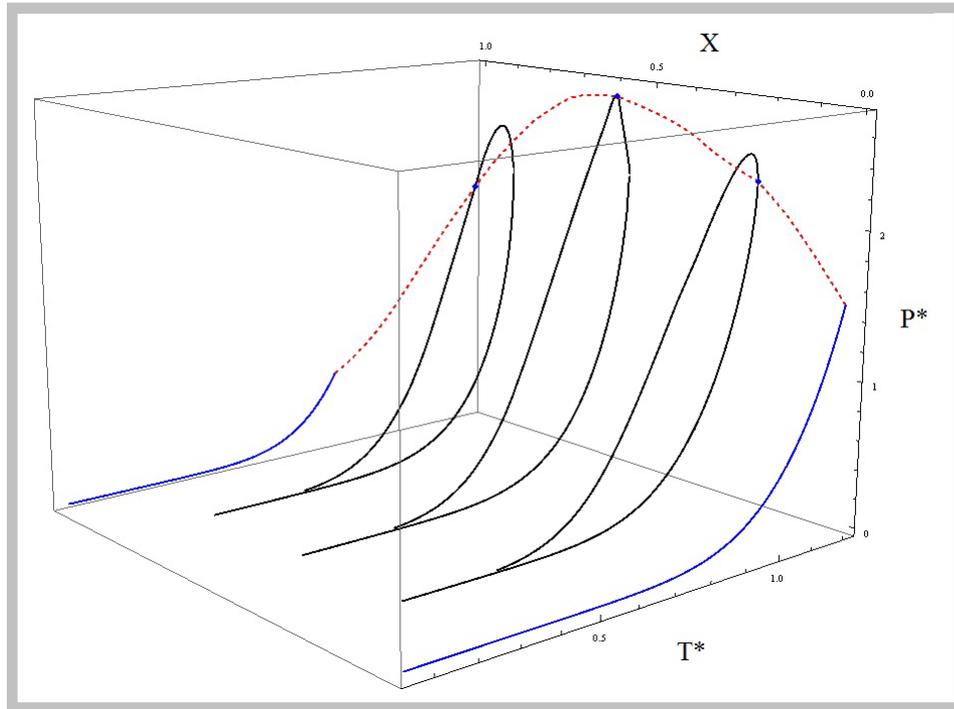


Stroev N., Iosilevskiy I., *Journal of Physics: Conf. Ser.*, **774**, (2016)



The simplest example of non-congruent PT in modified model of binary ionic mixture

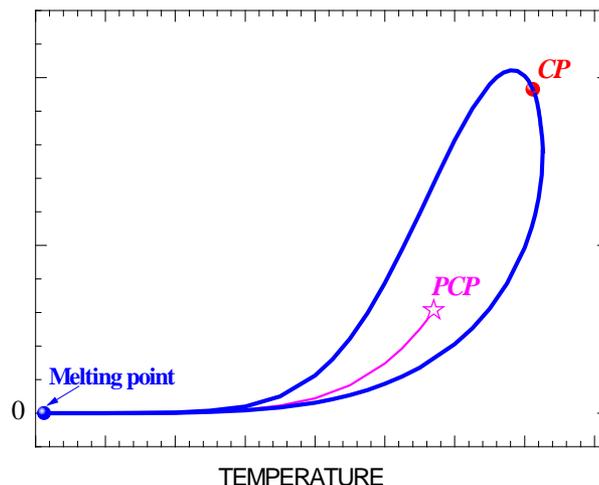
(“Инфузория” в мире неконгруэнтных ФП-с)



Никита Строев (+ ИЛИ) [PNP-2015](#) (Almaty):
Stroev N., Iosilevskiy I., *Journal of Physics: Conf. Ser.*, **774**, (2016)

Неконгруэнтные фазовые переходы

общее правило!



Галогениды металлов

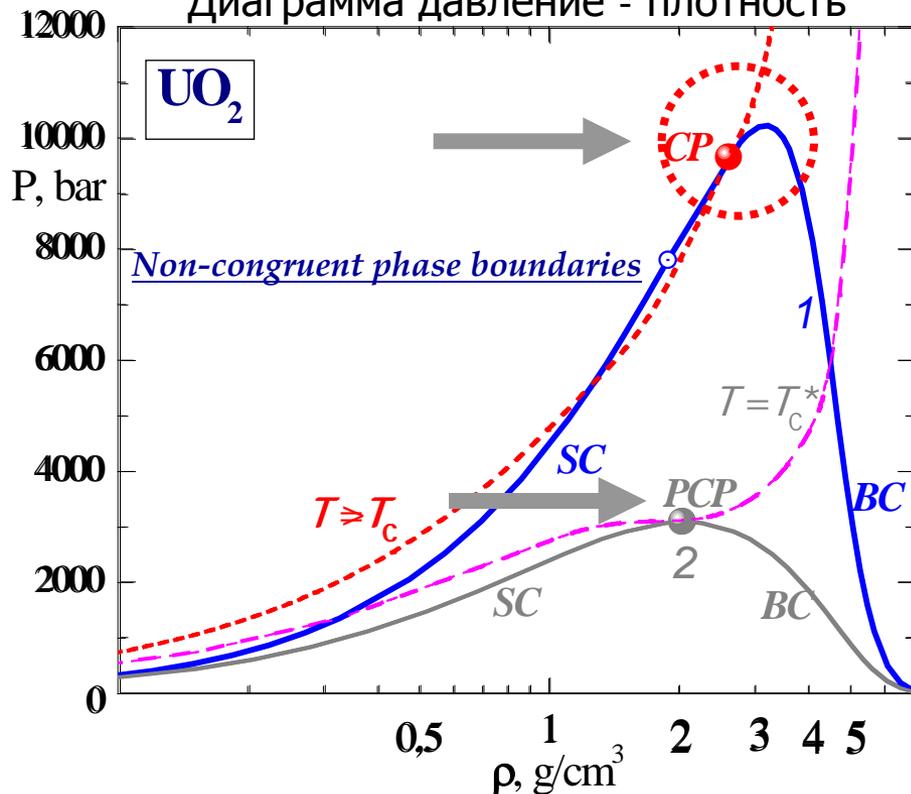
(*NaCl, ... KBr, ... CsF, ... etc.*)

Многолетнее противоречие между структурой фазовых диаграмм, получаемых в рамках прямого численного моделирования галогенидов металлов, как ионных систем,и предсказаниями "Химической Модели Плазмы", рассчитанными согласно условиям Гиббса - Гуггенхейма

Неконгруэнтное испарение в U-O системе

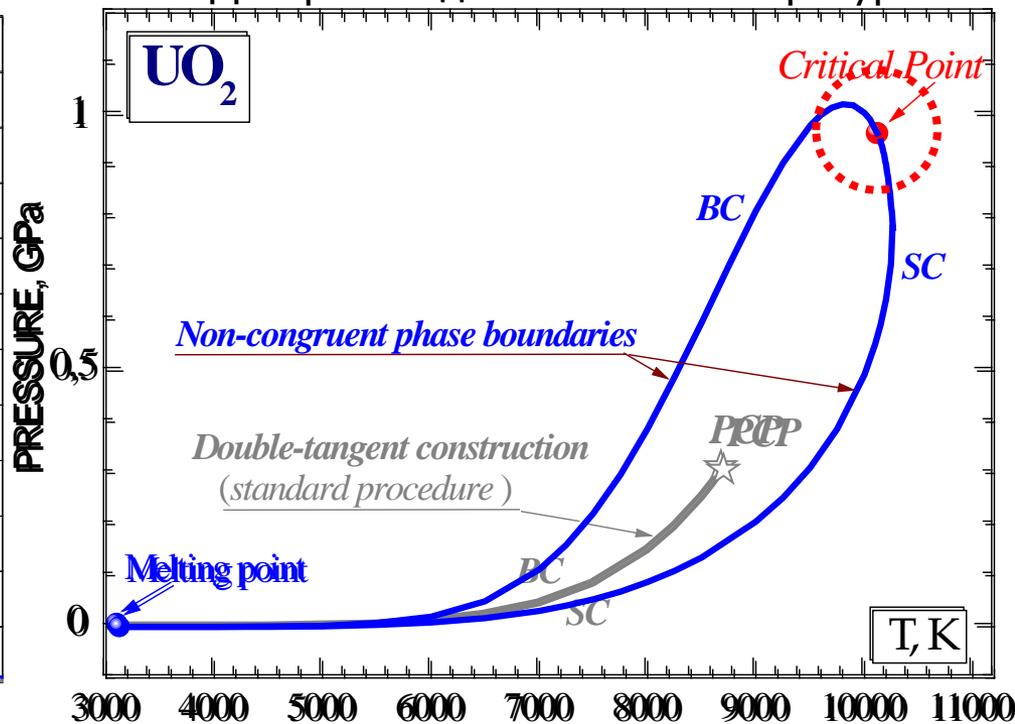
Химическая модель плазмы (код SAHA)

Диаграмма давление - плотность



- 1 – Неконгруэнтное (полное) равновесие
2 – Принудительно-конгруэнтное равновесие

Диаграмма давление - температура



- BC – Граница кипения жидкости
SC – Граница насыщения пара

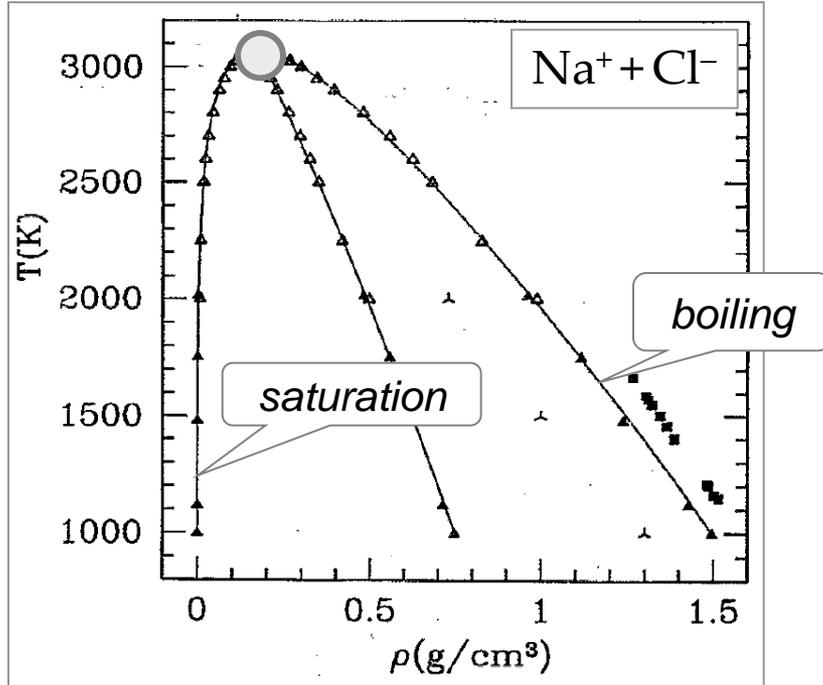
NB! 2-dimensional two-phase region instead of standard P - T saturation curve

NB! High pressure level of non-congruent phase decomposition

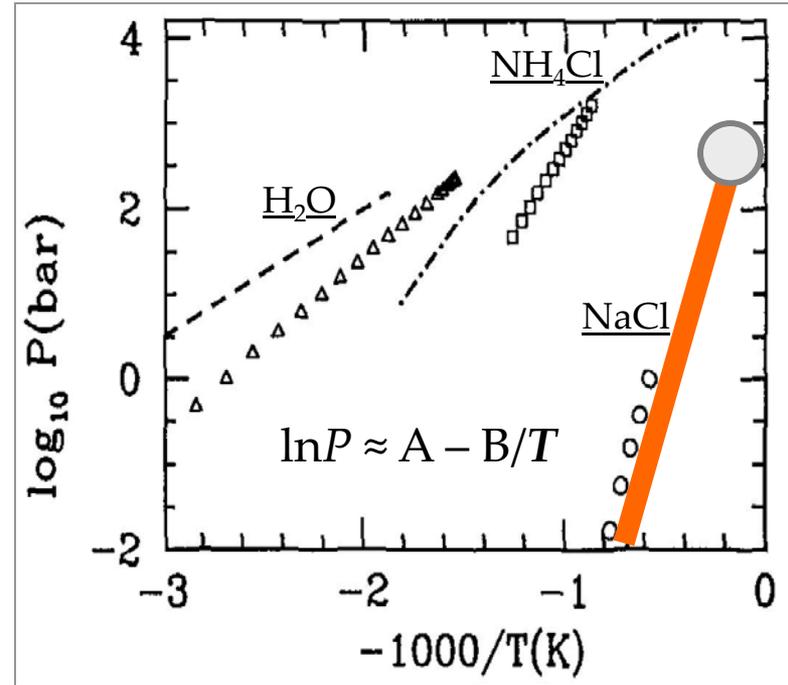
NB! Critical point should be of non-standard type: $(\partial P / \partial V)_T \neq 0$ $(\partial^2 P / \partial V^2)_T \neq 0$
It should be instead: $(\text{O}/\text{U})_{\text{liquid}} = (\text{O}/\text{U})_{\text{vapor}}$ and $\{ \partial \mu_i / \partial n_k \}_T \big|_{\text{CP}} = \mathbf{0}$

Numerical modeling of gas-liquid phase transitions in ionic liquids and molten salts

(Guilliot B., Guissani Y. *J.Ch.Ph.* (1994 / 1996))



The liquid-vapor coexistence curve of simulated NaCl.



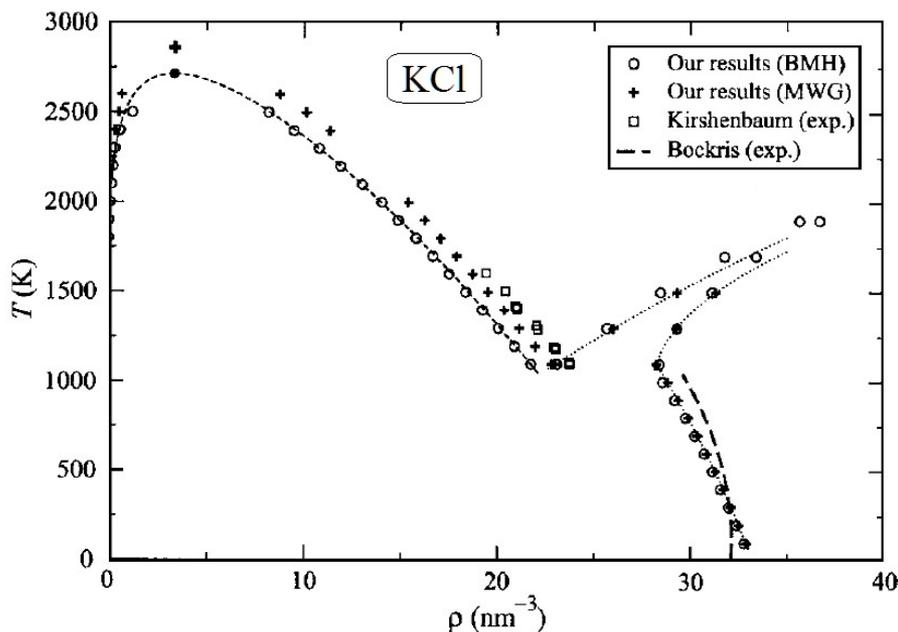
Pressure-temperature diagram of ionic liquids

Standard point of view (*)

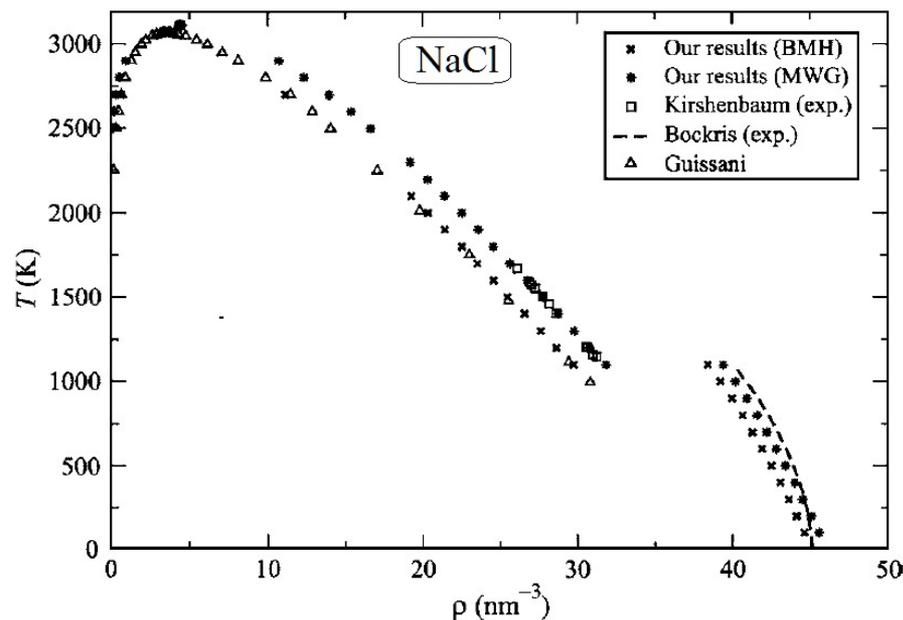
- Gas-Liquid phase transition is of ordinary type,
- Critical point of G-L phase transition is of ordinary type,
- Critical exponents ($\alpha, \beta, \gamma, \dots$) are of ordinary type (Ising \Leftrightarrow Van der Waals)

Numerical modeling of gas-liquid phase transitions in ionic liquids and molten salts

(Rodrigues P., Silva-Fernandes M., *J.Chem.Phys.* (2007))



Comparison of the BMH and MWG models for KCl.



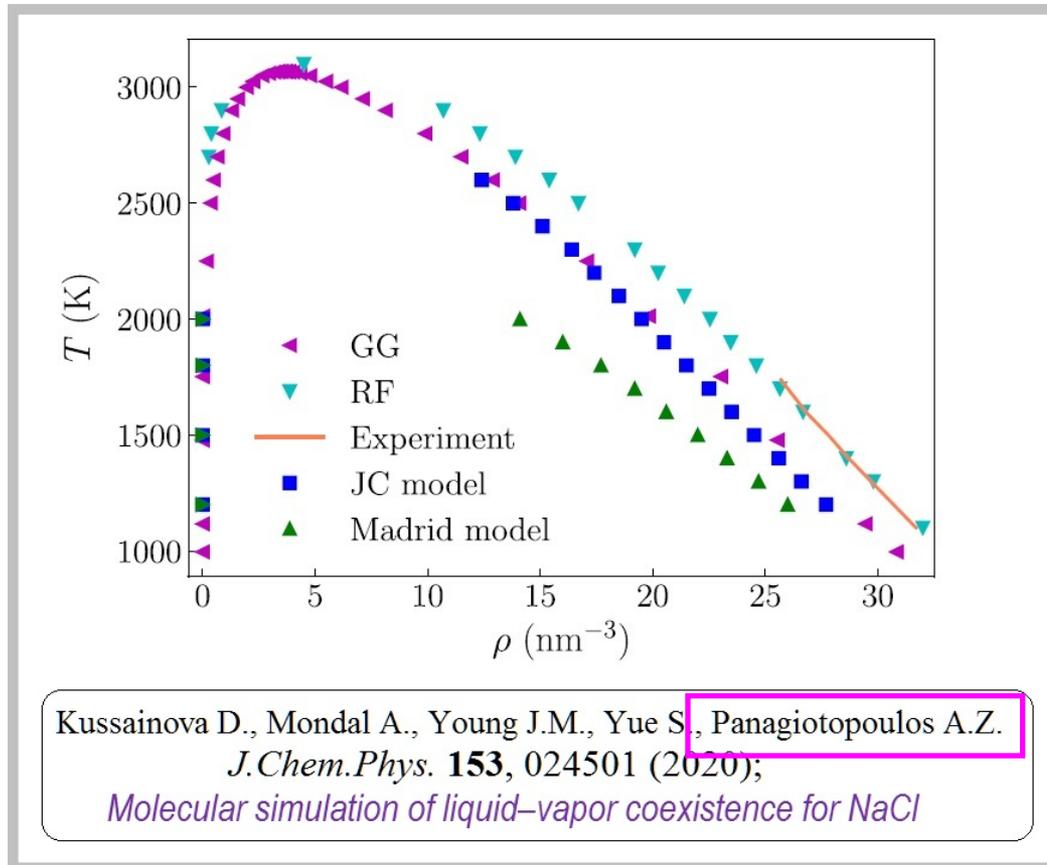
Predicted and experimental values for the NaCl phase diagram.

Rodrigues P.C.R., Silva-Fernandes M.S. *J.Chem.Phys.* **126**, (2007)

Phase diagrams of alkali halides using two interaction models: A molecular dynamics and free energy study

Numerical modeling of gas-liquid phase transitions in ionic liquids and molten salts

Kussainova D., Panagiotopoulos A. *et al*, *J.Chem.Phys.* (2020)



GG – Guillot & Guissani – 1994
RF – Rodrigues & Fernandes – 2007

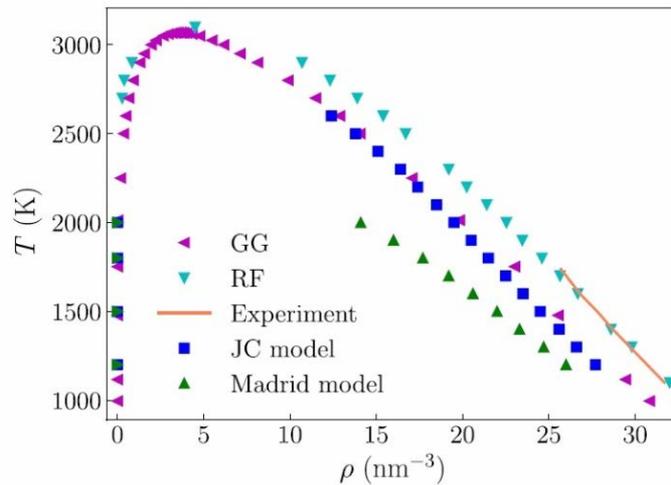
Проблема

Противоречие в предсказаниях двух подходов

Прямое численное моделирование

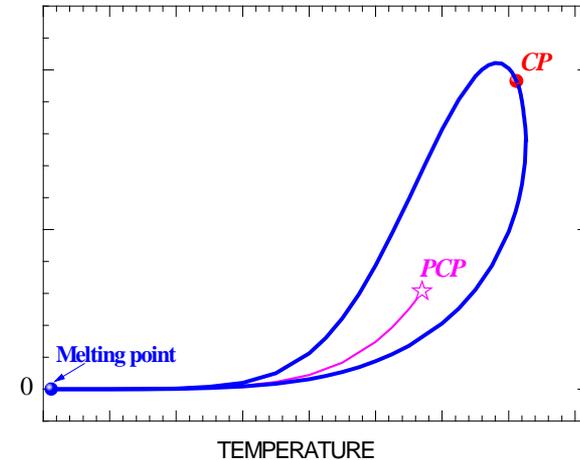
Химическая модель плазмы

Ионная модель



Обычная (Ван дер Ваальсова) структура фазовых диаграмм

Код SAHA-UO2



Неконгруэнтная структура всех фазовых диаграмм

Кто прав ?!



Athanassios Z. Panagiotopoulos (Princeton)

Hirsh – 62, Citations – 14900 !!

“...We use the “Deep Potential” molecular dynamics (DPMD) approach of Car and coworkers [1] to develop Force Fields for fluids. The approach involves selecting a number of configurations for a system at thermodynamic state points representative of the conditions of interest...

...Kohn-Sham density functional theory is then used to obtain the “reference” energies of the corresponding configurations...”
[J.Chem.Phys. 153 (2020)]

Numerical modeling of gas-liquid phase transitions in ionic liquids and molten salts



... предсказания "Химической Модели Плазмы", основанные на расчетах ФП согласно условиям Гиббса - Гуггенхейма

Возможные пути решения

Эксперимент

Что следует измерять

- (1) – Давление пара $P(T)$
- (2) – Состав газовой фазы
- (3) – Район критической точки
- (4) –

Кто возьмется ?

Первопринципный (QMD) расчет

Что следует рассчитывать

- (1) – Непосредственное равновесие фаз (г-ж) в режиме кипения (Bubble point) и в режиме насыщения (Dew point)
- (2) – Хим.потенциал Na или Cl в жидкой фазе

Кто возьмется ?

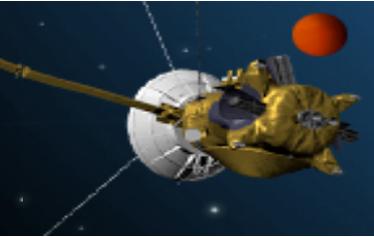
Химическая модель плазмы

Расчет неконгруэнтного равновесия газ – жидкость в NaCl
(по методике хим.модели – код SAHA)

In progress ...

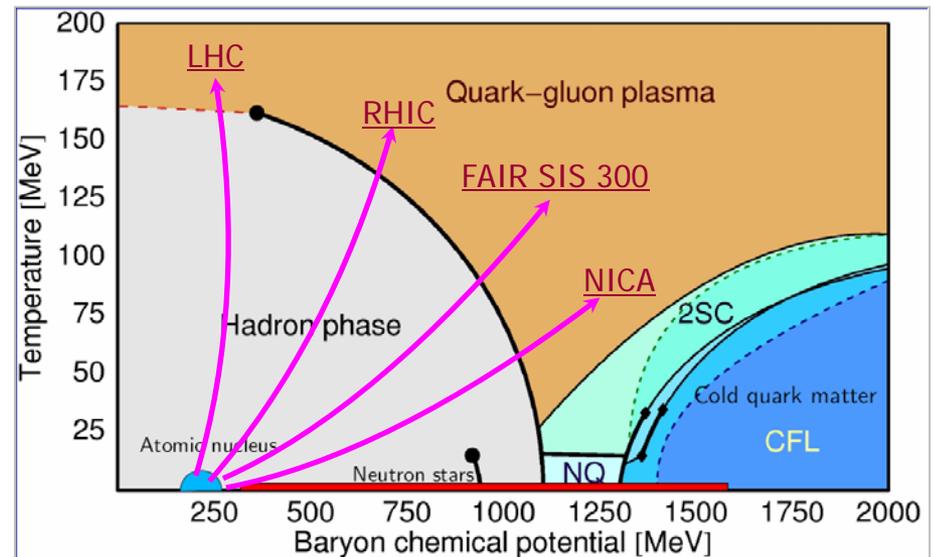
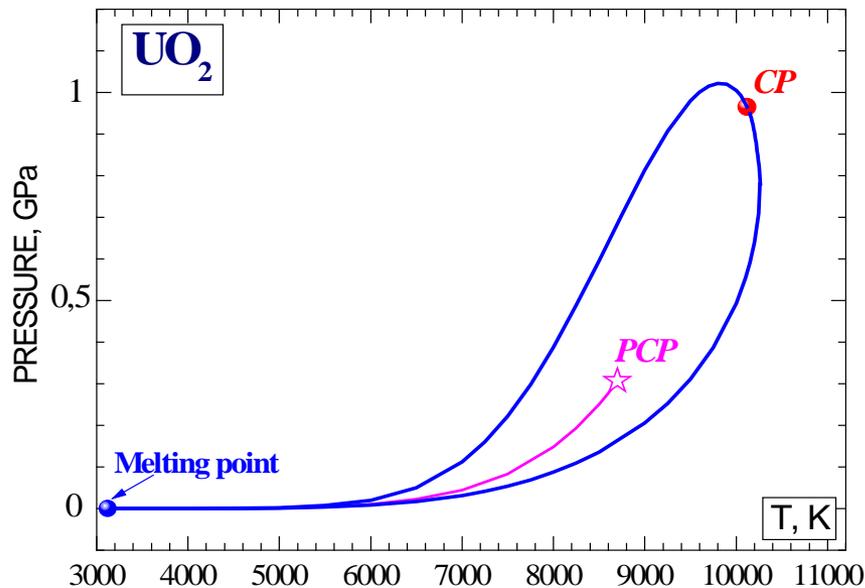
Cassini-Huygens

MISSION TO SATURN & TITAN



Non-Congruent Phase Transitions in Cosmic Matter and in Laboratory

Спасибо!



Support: INTAS 93-66 // CRDF № MO-011-0 // ISTC 3755

RAS Scientific Programs:
"Physics of Extreme States of Matter"