

# ОЦЕНКА КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ ТУГОПЛАВКИХ МЕТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ ПЕРВОПРИНЦИПНЫХ РАСЧЕТОВ

*Левашов П.Р.,<sup>\*1,2</sup> Минаков Д.В.<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>ОИВТ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>МФТИ, Долгопрудный, Россия  
*\*pasha@ihed.ras.ru*

Критические точки большинства металлов в настоящее время неизвестны. Экспериментальное измерение критических параметров металлов очень сложно выполнить в силу чрезвычайно высоких температур (выше 3000 К) и давлений (от единиц до десятков килобар). Теоретический расчет околокритического металлического флюида представляет значительные трудности из-за вырождения электронной подсистемы и сильного взаимодействия. Существуют лишь модельные оценки критических точек, которые имеют особенно большой разброс для тугоплавких металлов [1]. Между тем, положение бинодали и критической точки на фазовой диаграмме металлов необходимо знать для построения адекватных уравнений состояния при плотностях ниже нормальной. Кроме того, в околокритической области металлов предсказаны интересные явления, в частности, переход металл-диэлектрик и образование кластеров.

Некоторую информацию о положении критических точек могут дать только импульсные эксперименты, в частности, по изоэнтропическому [2] и изобарическому [3] расширению. В экспериментах по изоэнтропическому расширению с пористыми образцами удается наблюдать испарение металла при его расширении в различные преграды. Изобарическое расширение под действием мощных импульсов тока позволяет исследовать свойства вещества вблизи кривой фазового равновесия жидкость–пар. Однако, до недавнего времени не существовало моделей, которые могли бы непротиворечиво описать оба этих типа данных, в частности, для вольфрама и молибдена. В данной работе будет представлен обзор подходов для определения критических параметров тугоплавких металлов. Также будут обсуждаться результаты квантовых молекулярно-динамических расчетов для интерпретации экспериментальных данных и оценки критических параметров тантала, вольфрама и молибдена.

- 
1. Minakov D. V., Paramonov M. A., Levashov P. R. // Phys. Rev. B. 2018. V. 97. P. 024205.
  2. Gudarenko L. F. , Gushchina O. N. , Zhernokletov M. Yu., Medvedev A. B. and Simakov G. V. // High Temp. 2000. V. 38. P. 413.
  3. Gathers G. R. // Rep. Prog. Phys. 1986. V. 49. P. 341.