

**СОВМЕСТНОЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И  
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ  
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ  
СВОЙСТВ ЦИРКОНИЯ МЕТОДАМИ КВАНТОВОЙ  
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И  
ВЫСОКОСКОРОСТНОГО ИМПУЛЬСНОГО НАГРЕВА**

*Минаков Д.В.,\* Парамонов М.А., Дороватовский А.В.,  
Фокин В.Б., Шейндлин М.А., Левашов П.Р.*

*ОИВТ РАН, Москва, Россия*

*\*minakovd@ihed.ras.ru*

Будут представлены последние достижения в описании термодинамических, транспортных и оптических свойств твердого и жидкого Zr в широком диапазоне параметров: от окрестности плавления до критической точки, методом квантовой молекулярной динамики (КМД). Основное внимание уделено анализу теплового расширения, энтальпии, удельного сопротивления и нормальной спектральной излучательной способности. Впервые выполнена оценка параметров критической точки циркония первопринципным методом КМД. Рассчитаны зависимости плотности, энтальпии, изобарной и изохорной теплоемкостей, параметра Грюнайзена и скорости звука от температуры вдоль критической изобары.

Также в докладе будут представлены новейшие высокотемпературные экспериментальные данные по высокоскоростному импульсному нагреву электрическим током циркониевых проволок вплоть до 6000 К. Отмечается отличное согласие между измерениями энтальпии и расчетом. Хорошее согласие наблюдается между зависимостью плотности от температуры вдоль критической изобары, полученной в расчете и в эксперименте. Обсуждаются результаты первопринципных расчетов удельного сопротивления для Zr с помощью формулы Кубо–Гринвуда и сравнение с результатами экспериментальных измерений. Впервые представлены *ab initio* расчеты нормальной спектральной излучательной способности Zr вдоль критической изобары.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 20-79-10398, <https://rscf.ru/project/20-79-10398/>