

ЖЕЛЕЗО: ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НА ОСНОВЕ ПЕРВОПРИНЦИПНЫХ РАСЧЕТОВ И ЭКСПЕРИМЕНТА ПО ИМПУЛЬСНОМУ НАГРЕВУ

Гальцов И. С.,^{*1,2} Парамонов М. А.,^{1,2} Фокин В. Б.,^{1,2}
Минаков Д. В.,^{1,2} Дороватовский А. В.,¹ Шейндлин М. А.¹

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МФТИ, Долгопрудный, Россия

*galtsov.is@phystech.edu

Железо является наиболее важным компонентом конструкционных материалов, которые подвергаются интенсивным механическим и термическим нагрузкам. Поэтому большую значимость представляет получение надежных данных как об уравнении состояния железа, так и о его транспортных и оптических свойствах. Однако на сегодняшний день существует множество противоречивых данных о параметрах теплового расширения железа и величине его удельного сопротивления, в особенности в жидкой фазе.

В данной работе представлены результаты исследования теплофизических свойств железа двумя независимыми подходами: теоретическим – на основе расчетов методом квантовой молекулярной динамики, и экспериментальным – в опытах по электровзрыву железных проволок путем микросекундного импульсного нагрева. Отдельное внимание уделено необходимости учета спиновой поляризации для более корректного описания свойств железа при проведении первопринципных расчетов. Восстановлены кривая теплового расширения железа и температурная зависимость энтальпии как с учетом, так и без учета спиновой поляризации. Приведено сравнение с экспериментальными данными, в том числе полученными авторами этой работы. Также из *ab initio* расчетов найдены удельное сопротивление и нормальная спектральная излучательная способность твердого и жидкого железа. Эти данные получены с использованием формулы Кубо–Гринвуда и преобразования Крамерса–Кронига. Методом последовательного приближения к критической изотерме получена оценка параметров железа в критической точке.

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