

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТАЛЛОВ В ОКОЛОКРИТИЧЕСКОМ СОСТОЯНИИ МЕТОДОМ КВАНТОВОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

*Парамонов М.А.,^{*1,2} Минаков Д.В.,^{1,2} Левашов П.Р.^{1,2}*

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

**mikhail.a.paramonov@phystech.edu*

Знание высокотемпературных теплофизических свойств материалов, используемых в атомной энергетике, а также их уравнений состояния (УРС), представляет критическую важность для анализа ядерной безопасности и моделирования поведения атомных реакторов при экстремальных условиях. Область жидкой фазы вещества и сверхкритическое состояние можно достичь в ударно-волновых экспериментах, однако, имеется лишь небольшое количество измерений температуры сжатых металлов. Особую ценность представляют полные термодинамические данные, получаемые с помощью метода изобарического расширения (ИЕХ), но скорость и сложность происходящих физических процессов часто затрудняет интерпретацию результатов таких экспериментов. А теоретическое описание области высоких температур и давлений также затруднено из-за сложной электронной структуры и сильного кулоновского взаимодействия в плазме вольфрама, молибдена и циркония.

Таким образом, в настоящее время единственным доступным теоретическим подходом, который может дать информацию о теплофизических свойствах вещества в области горячей расширенной жидкости, является первопринципный метод квантовой молекулярной динамики (КМД), основанный на теории функционала электронной плотности.

В данной работе на основе данных табличного УРС из КМД расчетов были оценены критические параметры и восстановлены критические изобары вольфрама, молибдена и циркония. Это позволило оценить кривые сосуществования жидкость–газ на фазовых диаграммах. Полученные новые данные помогут улучшить существующие определяющие соотношения для этих металлов, исключив неопределенность в их теплофизических свойствах при высоких температурах.

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