

Расчёты упругих и термодинамических свойств Mo, Ta и W при высоких давлениях и температурах

Смирнов Н.А.^{1,®}

¹ Федеральное государственное унитарное предприятие "Российский федеральный ядерный центр - академик Забабахин Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики Васильева 13, Снежинск, Челябинская область, 456770, Россия

® deldavis@mail.ru

В этой работе с привлечением теории функционала электронной плотности исследовались некоторые упругие и термодинамические свойства тугоплавких металлов молибдена, тантала и вольфрама при высоких давлениях и температурах. Были рассчитаны тепловое расширение, изотермы, ударные адиабаты, упругие константы, скорости звука и кривые плавления исследованных металлов. Вычисления выполнены в рамках квазигармонического приближения, опирающегося на расчёты фононных спектров при нулевой температуре, а также по классической модели среднего потенциала, которая позволяет приближённо учесть ангармонические эффекты. Определено влияние ангармонизма на различные термодинамические характеристики Mo, Ta и W. Показано, что наибольшее влияние данные эффекты оказывают на свойства Mo и W, а их учёт позволяет добиться лучшего согласия результатов расчётов и эксперимента. В случае тантала квазигармоническое приближение адекватно описывает все исследованные в работе термодинамические характеристики. Модель среднего потенциала показала высокую эффективность при расчётах свойств Mo, Ta и W. При этом она является простой и наименее затратной по времени счёта даже по сравнению с вычислениями в квазигармоническом приближении, которое использовалось в данной работе.