

Расчёт термодинамических свойств плотной плазмы металлов палладиевой группы в широком диапазоне температур и плотностей

Шумихин А.С.^{1,®}

¹ Объединенный институт высоких температур Российской академии наук,
Ижорская ул., 13, стр. 2, Москва, 125412, Россия

® shum_ac@mail.ru

В данном исследовании рассматриваются две химические модели для описания плотной плазмы металлов палладиевой группы (Zr, Nb). Первая – вириальная химическая модель (ВХМ) [1], которая учитывает электроны, ионы, атомы, а также атомы с двойной и тройной ионизацией. Вторая модель – модель «3+» [2], которая учитывает только электроны, ионы и атомы. Сочетание двух химических моделей позволяет рассчитать тепловые и калорические уравнения состояния циркония и ниобия в диапазоне температур от 5000 до 100000 К и плотностей от $0,01 < \rho < \rho_0/2$, где ρ_0 – плотность металла в твердом состоянии. При низких плотностях ($\rho < 0,5$ г/см³) предлагается использовать модель Ван-дер-Ваальса, учитывающую взаимодействие зарядов, для чего выбирается дебаевское приближение в большом каноническом ансамбле [3, 4]. Для расчета термодинамических свойств в околукритической области используется модель «3+», учитывающая межатомное взаимодействие с помощью энергии когезии. Результаты расчетов, полученные с помощью предложенных моделей, показали удовлетворительное соответствие с результатами недавних численных расчетов [5] для циркония.

[1] Shumikhin A S 2025 *Eur. Phys. J. D* **79** 112

[2] Khomkin A L and Shumikhin A S 2021 *Phys. Usp.* **64**(11) 1125–1148

[3] Likalter A A 1969 *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **56** 240

[4] Gryaznov V K, Iosilevskii I L and Fortov V E 1973 *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* **14**(3) 353

[5] Paramonov M A, Minakov D V, Dorovatovsky A V, Sheindlin M A, Fokin V B, Demyanov G S and Levashov P R 2024 *Phys. Rev. B* **110** 184204