

# О температурной зависимости вязкости расплава гидрида лития

А. Л. Фальков

Научно-теоретическое отделение №1, отдел 16

Федеральное государственное унитарное предприятие  
Российский федеральный ядерный центр —  
Всероссийский НИИ технической физики имени академика Е. И. Забабахина

Снежинск — 2025



# Актуальность работ

по исследованию вязкости расплава гидрида лития

## Технические приложения:

- ▶ Гидрид лития ( $\text{LiH}$ ) — соединение с высокой теплоёмкостью [1].
- ▶  $\text{LiH}$  может быть использован в качестве теплозащитного покрытия для спускаемых космических аппаратов и сопел двигателей [2].
- ▶  $\text{LiH}$  в расплавленном состоянии — сильный восстановитель.
- ▶ Сырьё для производства  $\text{Li}[\text{AlH}_4]$ .
- ▶  $\text{LiH}$  — хороший замедлитель нейтронов в реакторостроении.

## Сложности и проблемы:

- ▶ В настоящее время в открытой печати опубликованы результаты измерения вязкости расплава  $\text{LiH}$ , полученные двумя группами исследователей [3] (в диапазоне  $690-1050^\circ\text{C}$ ) и [4,5] (в диапазоне  $678-859^\circ\text{C}$ ).
- ▶ Указанные экспериментальные данные сильно разнятся между собой. Например, при температуре около  $800^\circ\text{C}$  наблюдаются двухкратные расхождения коэффициента вязкости из работ [3] и [4,5].

Расчёты течений в пограничных слоях требуют знания температурной зависимости вязкости расплава  $\text{LiH}$ , которая изучена недостаточно подробно.

# Разногласия в результатах экспериментов

Экспериментальные данные цит. по работе [1]

Данные МИФИ [3]

| $t, ^\circ\text{C}$ | $\mu, \text{сП}$ | $t, ^\circ\text{C}$ | $\mu, \text{сП}$ |
|---------------------|------------------|---------------------|------------------|
| 692                 | 0.789            | 877                 | 0.562            |
| 727                 | 0.746            | 927                 | 0.500            |
| <b>777</b>          | <b>0.685</b>     | 977                 | 0.438            |
| <b>827</b>          | <b>0.623</b>     | 1027                | 0.377            |

Вискозиметр Швидковского: метод затухания крутильных колебаний стаканчика с исследуемым веществом. Атмосфера Ar. Погрешность — 3%. Измерение кинематической вязкости  $\nu \equiv \eta/\rho$ . Вспомогательные дилатометрические измерения плотности в зависимости от температуры.

Данные «General Electric» [4,5]

| $t, ^\circ\text{C}$ | $\mu, \text{сП}$ | $t, ^\circ\text{C}$ | $\mu, \text{сП}$ |
|---------------------|------------------|---------------------|------------------|
| 680                 | 0.38             | <b>780</b>          | <b>0.303</b>     |
| 700                 | 0.364            | <b>800</b>          | <b>0.288</b>     |
| 720                 | 0.349            | 820                 | 0.272            |
| 740                 | 0.334            | 840                 | 0.257            |
| 760                 | 0.318            | 860                 | 0.242            |

Вискозиметр Брукфильда: метод коаксиальных цилиндров. Определение вязкости по углу закручивания упругого нитяного подвеса. Атмосфера  $\text{H}_2$ ,  $p = 1.5$  атм. Прямое измерение динамической вязкости  $\eta$ . Гистерезис. Разброс данных  $\pm(15 \div 20)\%$ .

# Теоретическая модель Старретта и Саумона

Эффективная потенциальная энергия взаимодействия между ионами

$$V(r) = \hat{\mathfrak{F}}_s^{-1} [V(k)], \quad \beta V(k) = \frac{4\pi\beta}{k^2} Z_\star^2 - n_e^{\text{scr}}(k) c_{le} \left( k, \bar{n}_e^0 \right). \quad (1)$$

$$Z_\star = Z - \int_{V_\infty} dr n_{e,b}(r) = \int_{V_\infty} dr n_e^{\text{scr}}(r), \quad \bar{n}_e^0 = Z_\star n_l^0, \quad (2)$$

$$c_{le} \left( k, \bar{n}_e^0 \right) = -\beta n_e^{\text{scr}}(k) / \chi_e(k). \quad (3)$$

Знание  $V(r)$  позволяет решить задачу описания траекторий, скоростей псевдоатомов и найти радиальную функцию распределения ионов  $g_{ll}(r)$  (ПАМД):

$$g_{ll}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \stackrel{\text{def}}{=} \left\langle \frac{N_{\text{tot}}(N_{\text{tot}} - 1) \int d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_{N_{\text{tot}}} \exp \left( -\beta \sum_{i,j=1}^{N_{\text{tot}}} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \right)}{(n_l^0)^2 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_{N_{\text{tot}}} \exp \left( -\beta \sum_{i,j=1}^{N_{\text{tot}}} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \right)} \right\rangle, \quad (4)$$

## Экранирующая электронная плотность

$$Z = \int_{V_\infty} dr n_e^{\text{PA}}(r), \quad n_e^{\text{PA}}(r) = n_{e,b}(r) + n_e^{\text{scr}}(r), \quad (5)$$

где  $Z$  — заряд ядра, а  $n_e^{\text{PA}}$  — плотность электронов псевдоатома.  
Экранирующая электронная плотность  $n_e^{\text{scr}}(r)$ :

$$n_e^{\text{scr}}(r) = n_e(r) - n_{e,f}^{\text{ext}}(r) - n_{e,b}(r), \quad (6)$$

где  $n_e(r)$  — суммарная электронная плотность в полной модели среднего атома,  
 $n_{e,f}^{\text{ext}}(r)$  — плотность электронов в системе без ядра ( $Z \equiv 0$ ),  
 $n_{e,b}(r)$  — плотность связанных состояний электронов:

$$n_{e,b}(r) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \beta^{3/2}} \left\{ I_{1/2} \left[ \beta \left( \mu_e - V_{Ne}^{\text{eff}}(r) \right) \right] - \right. \\ \left. - J_{1/2} \left[ \beta \left( \mu_e - V_{Ne}^{\text{eff}}(r) \right), -\beta V_{Ne}^{\text{eff}}(r) \right] \right\} f_{\text{cut}}(r). \quad (7)$$

Для поиска электронных плотностей  $n_e(r)$ ,  $n_e^{\text{ext}}(r)$  и  $n_{e,b}(r)$  необходимо дважды численно решить систему уравнений Пуассона.

# Квазиклассическое описание электронной подсистемы в ионно-корреляционной теоретической модели

$$I. \begin{cases} n_e(r) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \beta^{3/2}} l_{1/2}(\beta(\mu_e - V_{Ne}^{\text{eff}}(r))) + \delta n_e(r), \quad \beta = 1/T, \\ V_{Ne}^{\text{eff}}(r) = -\frac{Z}{r} + \int dr' \frac{n_e(r') - \langle Z \rangle n_I^0 \boxed{g_{II}(r)}(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \\ - \sqrt[3]{\frac{3n_e(r)}{\pi}} + \sqrt[3]{\frac{3n_e^0}{\pi}} + V_{Ie}^{e,c}[n_I(r)] + V_q(r). \end{cases} \quad (8)$$

$$\langle Z \rangle = n_e^0 / n_I^0 = \sqrt{2} l_{1/2}(\beta \mu_e) / \left( n_I^0 \pi^2 \beta^{3/2} \right). \quad (9)$$

$$V_{Ie}^{e,c}[n_I(r)] \propto -\frac{n_I^0}{\beta} \int_{V_\infty} dr' \widetilde{c}_{Ie}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, \overline{n_e^0}) \left( \boxed{g_{II}(r')} - 1 \right). \quad (10)$$

$$II. Z \neq 0 \rightarrow Z \equiv 0 \Rightarrow n_e \rightarrow n_{e,f}^{\text{ext}}(r), \quad V_{Ne}^{\text{eff}}(r) \rightarrow V_e^{\text{ext,eff}}(r) \quad (11)$$

# Псевдоатомная молекулярная динамика

Расчёт коэффициента вязкости в ходе ПАМД-моделирования [6–8]

$$\eta = \frac{1}{3TV} \int_0^{+\infty(t_*)} dt \sum_{\alpha < \beta} \langle \Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{0}, t) \Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{0}, 0) \rangle, \quad (12)$$

$$\Pi_{\alpha\beta}(\mathbf{0}, t) = \sum_{i=1}^{N_{tot}} \left( M v_{i\alpha} v_{i\beta} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^{N_{tot}} \frac{(r_{ij})_{\alpha} (r_{ij})_{\beta}}{r_{ij}} \frac{\partial V(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \right). \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha < \beta} \Pi_{\alpha\beta}(\dots) \Pi_{\alpha\beta}(\dots) &\equiv \Pi_{xy}(\dots) \Pi_{xy}(\dots) + \\ &+ \Pi_{xz}(\dots) \Pi_{xz}(\dots) + \Pi_{yz}(\dots) \Pi_{yz}(\dots). \end{aligned} \quad (14)$$

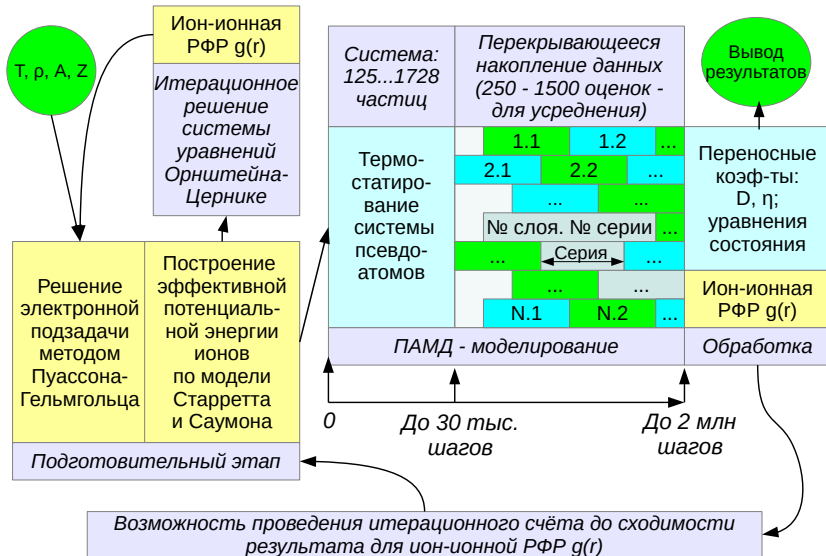
M. S. Green // J. Chem. Phys. 20 (8), 1281 (1952); 22 (3), 398 (1952).

R. Kubo, M. Yokota, S. Nakajima // J. Phys. Soc. Japan 12 (11), 1203 (1957).

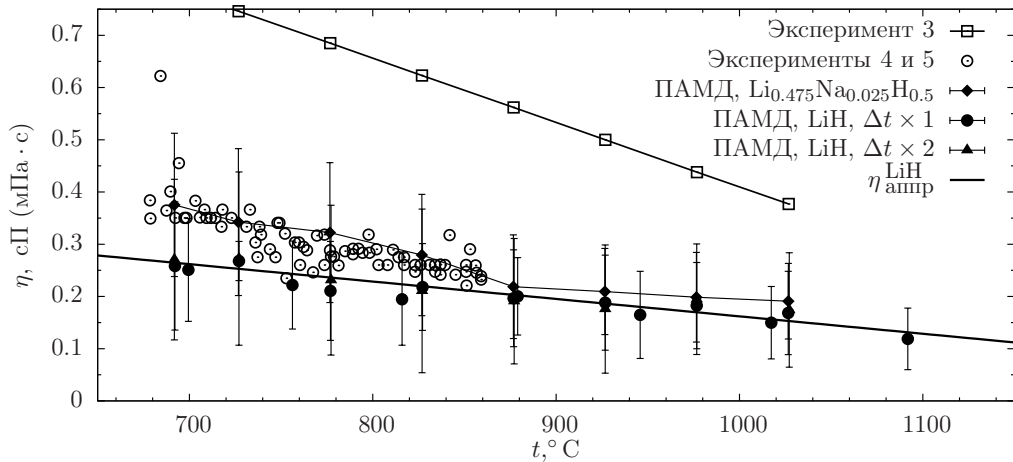
J.-P. Hansen, I. R. McDonald. Theory of Simple Liquids. — New York: Academic Press, 2006.

D. C. Rapaport. The Art of Molecular Dynamic Simulation. — Cambridge Univ. Press, 2004.

## Структурная схема программного комплекса



# Основные результаты математического моделирования



Достоверность результатов моделирования вязкости LiH косвенно подтверждается согласием расчётной вязкости расплава чистого лития при температуре от 320°C до 1200°C с экспериментальными данными, взятыми из справочника [9].

## Заключение

1. В рассмотренном диапазоне изменения температуры расчётная вязкость расплава гидрида лития LiH хорошо согласуется с результатами работы [4,5], но противоречит результатам отечественной работы [3].
2. Расхождения с результатами эксперимента [3], вероятно, можно объяснить загрязнением исследуемого материала примесями более тяжёлых атомов, поскольку точный химический состав образцов из работы [3] неизвестен [1].
3. Учёт примеси натрия (от 2.5% ат. до 20% ат. от исходного содержания лития) не привёл к существенному сдвигу расчётных кривых в сторону экспериментальных данных [3], тогда как наилучшее согласие с данными [4,5] отмечено как раз для состава  $\text{Li}_{0.475}\text{Na}_{0.025}\text{H}_{0.5}$ .
4. Результаты ПАМД-моделирования могут быть аппроксимированы зависимостью, которую удобно использовать при проведении инженерных расчётов:

$$\eta_{\text{аппр}}^{\text{LiH}}[\text{сП}] = 0.495 \pm 0.023 - (3.33 \pm 0.27) \times 10^{-4}t, \quad 670^\circ\text{C} < t < 1100^\circ\text{C}. \quad (15)$$

5. Должны быть продолжены систематические экспериментальные и расчётные исследования вязкости расплава LiH.

## Список использованных источников

1. Якимович К. А., Мозговой А. Г. Изотопные модификации гидрида лития и их растворы с литием. Теплофизические и физико-химические свойства / Под ред. Э. Э. Шпильрайна. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 280 с.
2. Товстоног В. А. Оценка применимости гидрида лития в системе активной тепловой защиты высокоскоростных летательных аппаратов // Вестник МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. Машиностроение. – 2019. №2 (125). – С. 47 – 59.
3. Данные группы Новикова, Ахматовой и Соловьёва (МИФИ, 1959), цит. по: Шпильрайн Э. Э., Якимович К. А. Гидрид лития. Физико-химические и теплофизические свойства – М.: Изд-во стандартов, 1972. – 108 с.
4. Welch F. H. Properties of Lithium Hydride. III. Report XDC-61-5-67. – Cincinnati, OH, USA: General Electric Co., 1961. – 9 p.
5. Welch F. H., Northrup H. W., Mink W. H. et al. Viscosity of Lithium Hydride from 1252 F to 1578 F. Report XDC-61-4-59. – Cincinnati, OH, USA: General Electric Co., 1963. – 20 p.

## Список использованных источников

6. Starrett C. E., Daligault J., Saumon D. Pseudoatom molecular dynamics [Текст] // Phys. Rev. E. – 2015. – Vol. 91. – P. 013104.
7. Фальков А. Л., Лобода П. А., Овечкин А. А., Ивлиев С. В. Метод псевдоатомной молекулярной динамики для расчёта коэффициентов вязкости и ионной самодиффузии плотной плазмы [Текст] // ЖЭТФ. – 2022. – Т. 161, №3. – С. 438 – 452.
8. Фальков А. Л. Структурные и теплофизические свойства плотного ионизованного вещества с учётом кулоновских корреляций ионов. // Диссертация, представленная на соискание учёной степени к.ф.-м.н. — М., Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2024. — 175 с.
9. Лепинских Б. М., Белоусов А. А., Бахвалов С. Г. и др. Транспортные свойства металлических и шлаковых расплавов: Справ. изд. / Под ред. Н. А. Ватолина. — М.: Металлургия, 1995. — 649 с.