

О ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ВЯЗКОСТИ РАСПЛАВА ГИДРИДА ЛИТИЯ

А. Л. Фальков

ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина», Снежинск, Россия

Гидрид лития (LiH) – соединение с высокой теплоемкостью [1], которое может быть использовано в качестве разрушающегося теплозащитного покрытия для спускаемых космических аппаратов [2]. Расчеты течений в пограничных слоях требуют информации о температурной зависимости вязкости расплава LiH, которая изучена недостаточно подробно. В настоящее время в открытой печати опубликованы результаты измерения вязкости расплава LiH, полученные двумя группами исследователей [3] (в диапазоне 690–1050°C) и [4, 5] (в диапазоне 678–859°C), причем указанные экспериментальные данные сильно разнятся между собой. Например, при температуре около 800°C наблюдаются двукратные расхождения коэффициента вязкости из работ [3] и [4, 5].

Нами были предприняты расчеты коэффициента динамической вязкости LiH методом псевдоатомной молекулярной динамики (ПАМД) [6, 7] в диапазоне температур от 670 до 1100°C. Расчеты методом ПАМД экономичны и не требуют для своего проведения использования каких-либо дополнительных сведений, кроме данных о составе вещества, его температуре и плотности. Температурные зависимости плотности расплава LiH были взяты из работы [1].

Для обоснования устойчивости результатов математического моделирования проведены серии расчетов с вариацией величины базового шага интегрирования по времени, числа частиц в системе, а также плотности расплава. В частности, выполнены вспомогательные расчеты равновесной плотности расплава, отвечающей минимальной удельной свободной энергии Гельмгольца при заданной температуре. Все результаты расчетного моделирования вязкости LiH взаимно согласуются в пределах статистической неопределенности, присущей методу ПАМД. Кроме того, достоверность результатов моделирования вязкости LiH косвенно подтверждается согласием расчетной вязкости расплава чистого лития при температуре от 320 до 1200°C с экспериментальными данными, взятыми из справочника [8].

Результаты расчетов в сравнении с экспериментальными данными [3] и [4, 5] представлены на рисунке 1, из которого следует, что в рассмотренном диапазоне изменения температуры расчетная вязкость расплава гидрида лития LiH хорошо согласуется с результатами работы [4, 5], но противоречит результатам отечественной работы [3]. Расхождения с результатами эксперимента [3], вероятно, можно объяснить загрязнением исследуемого материала примесями более тяжелых атомов, поскольку

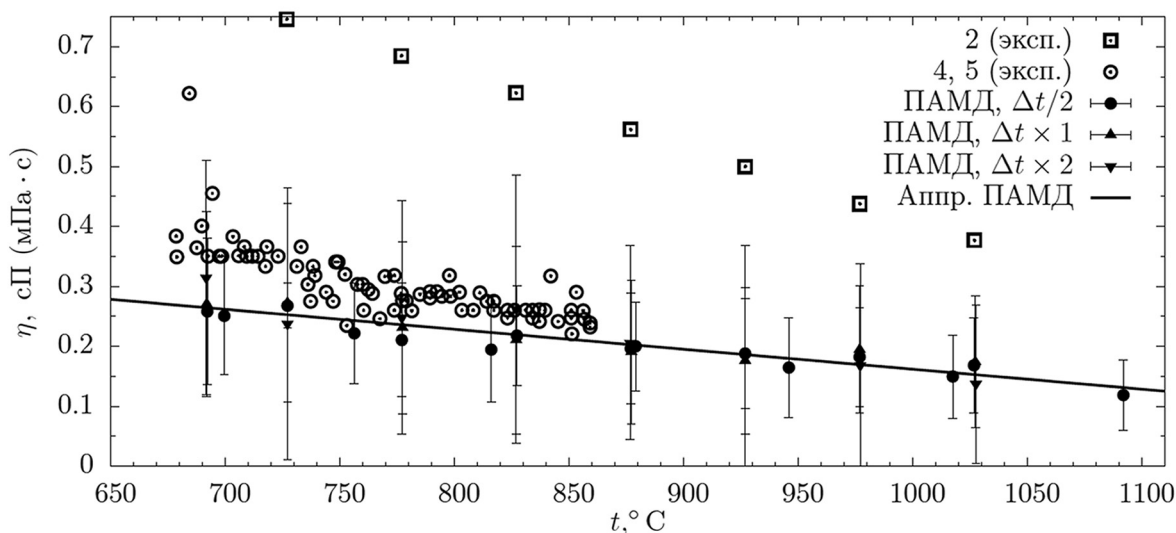


Рис. 1. Динамическая вязкость расплава гидрида лития при атмосферном давлении.

Сравнение результатов ПАМД-моделирования с экспериментальными данными

точный химический состав образцов из работы [3] нам не известен [1]. Однако учет примеси натрия (от 2,5 до 20% ат. от исходного содержания лития) не привел к существенному сдвигу расчетных кривых в сторону экспериментальных данных [3], тогда как наилучшее согласие с данными [4, 5] отмечено как раз для состава $\text{Li}_{0.475}\text{Na}_{0.025}\text{H}_{0.5}$. Таким образом, различия результатов ПАМД-расчетов и эксперимента [3] обусловлены наличием еще не выявленной систематической погрешности опыта. Детальные экспериментальные и расчетные исследования вязкости расплава LiH должны быть продолжены.

Результаты ПАМД-моделирования могут быть аппроксимированы аналитической зависимостью, которую удобно использовать при проведении инженерных расчетов:

$$\eta_{\text{анн}}^{\text{LiH}} [\text{сП}] = 0,495 \pm 0,023 - (3,33 \pm 0,27) \cdot 10^{-4} t, \quad 670 < t < 1100^\circ\text{C}.$$

Литература

1. **Якимович, К. А.** Изотопные модификации гидрида лития и их растворы с литием. Теплофизические и физико-химические свойства [Текст] / К. А. Якимович, А. Г. Мозговой; 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 [Текст] // 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 [Text]. – Cincinnati, OH, USA : General Electric Co., 1961. – 9 p.
 5. **Welch, F. H.** Viscosity of Lithium Hydride from 1252 F to 1578°F. Report XDC-61-4-59 [Text] / F. H. Welch, H. W. Northrup, W. H. Mink et al. – Cincinnati, OH, USA : General Electric Co., 1963. – 20 p.
 6. **Starrett, C. E.** Pseudomolecular dynamics [Text] / C. E. Starrett, J. Daligault, D. Saumon // Phys. Rev. E. – 2015. – Vol. 91. – P. 013104.
 7. **Фальков, А. Л.** Метод псевдоатомной молекулярной динамики для расчета коэффициентов вязкости и ионной самодиффузии плотной плазмы [Текст] / А. Л. Фальков, П. А. Лобода, А. А. Овечкин, С. В. Ивлиев // ЖЭТФ. – 2022. – Т. 161, № 3. – С. 438–452.
 8. **Лепинских, Б. М.** Транспортные свойства металлических и шлаковых расплавов [Текст] : справ. изд. / Б. М. Лепинских, А. А. Белоусов, С. Г. Бахвалов и др. ; под ред. Н. А. Ватолина. – М. : Металлургия, 1995. – 649 с.
-