

КВАНТОВОЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛОВ ЯДЕРНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ: ОТ ПЛАВЛЕНИЯ ДО КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ

Д. В. Минаков, М. А. Парамонов, В. Б. Фокин, И. С. Гальцов, Г. С. Демьянов, П. Р. Левашов

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

Мы представляем последние достижения в области моделирования термодинамических, транспортных и оптических свойств металлов в диапазоне температур от плавления до критической точки с использованием метода квантовой молекулярной динамики. Основное внимание уделено ключевым металлам, применяемым в ядерной энергетике, таким как цирконий [1, 2], никель [3] и гафний [4]. В работе исследуются их тепловое расширение, энтальпия, удельное электрическое сопротивление и нормальная спектральная излучательная способность.

Мы демонстрируем рассчитанные зависимости плотности, энтальпии, изобарной и изохорной теплоемкостей, параметра Грюнайзена и скорости звука от температуры вдоль критической изобары для этих металлов. Кроме того, представлены оценки их критических параметров, полученные на основе квантово-молекулярного моделирования сверхкритических изотерм. Также обсуждаются результаты расчетов удельного электрического сопротивления для циркония, гафния и никеля в широком диапазоне температур.

Полученные результаты сравниваются с имеющимися в литературе экспериментальными данными, а также с новейшими экспериментами, выполненными методом сверхбыстрого импульсного нагрева проводников электрическим током в рамках совместного расчетно-экспериментального проекта.

Отдельное внимание уделено *ab initio* расчетам нормальной спектральной излучательной способности для этих металлов в жидкой фазе вдоль критической изобары. Эти данные могут существенно улучшить качество пирометрических измерений температуры разогретых жидких металлов. Полученные результаты представляют значительный интерес для понимания поведения материалов в экстремальных условиях.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 20-79-10398).

Литература

1. **Paramonov, M. A.** High-temperature thermophysical properties of liquid zirconium: Quantum molecular dynamics and pulse heating experiment [Text] / M. A. Paramonov, D. V. Minakov, A. V. Dorovatovsky et al. // *Phys. Rev. B.* – 2024. – Vol. 110, No. 18. – P. 184204.
 2. **Paramonov, M. A.** *Ab initio* inspection of thermophysical experiments for zirconium near melting [Text] / M. A. Paramonov, D. V. Minakov, V. B. Fokin et al. // *Journal of Applied Physics.* – 2022. – Vol. 132, No. 6. – P. 65102.
 3. **Galtsov, I. S.** Thermophysical properties of solid and liquid nickel near melting point [Text] / I. S. Galtsov, V. B. Fokin, A. V. Dorovatovsky et al. // *Journal of Applied Physics.* – 2024. – Vol. 136, No. 14. – P. 145104.
 4. **Minakov, D. V.** *Ab initio* calculation of hafnium and zirconium melting curves via the Lindemann criterion [Text] / D. V. Minakov, M. A. Paramonov, G. S. Demyanov et al. // *Phys. Rev. B.* – 2022. – Vol. 106, No. 21. – P. 214105.
-