

ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИ ПОГРУЖЕННОГО АТОМА К ЖИДКИМ
МЕТАЛЛАМ. УРАН

Д. К. Белашенко, Д.Е. Смирнова

*Государственный технологический университет «Московский институт стали и сплавов»

E-mail: dkbel@mail.ru

Для урана применена методика расчета потенциала погруженного атома (ЕАМ), использующая дифракционные данные о структуре жидкости вблизи от температуры плавления, а также данные о давлении урана вдоль ударных адиабат. При использовании метода молекулярной динамики (МД) и потенциала ЕАМ удается получить хорошее согласие с опытом по структуре, плотности и потенциальной энергии жидкого металла при температурах до 5000 К, а также вдоль ударной адиабаты до давлений ~ 220 ГПа. Расчетный модуль всестороннего сжатия при 1406 К близок к фактическому. Коэффициенты самодиффузии при изобарном нагревании возрастают с температурой по степенному закону с показателем ~ 2.103 . Определены значения динамической вязкости при температурах до 6000 К. Полученный потенциал недостаточно адекватен для описания ОЦК урана при нормальных условиях. Температура плавления урана с потенциалом ЕАМ равна 1455 ± 2 К и немного выше реальной. Для получения согласия с опытом по энергии вдоль изобары $p = 0$ пришлось принять, что в потенциал ЕАМ следует включить специфический вклад в энергию, описывающий возбуждение атомных электронов урана и обуславливающий высокую теплоемкость. Величина этого вклада достигает почти 100 кДж/моль при 5000 К. Однако в случае сильно сжатых состояний этот вклад не обнаруживается. Это означает, видимо, что сжатие системы подавляет процессы возбуждения атомных электронов. Рассчитаны термодинамические свойства ОЦК и жидкого урана при давлениях до 220 ГПа и температурах до 12000 К.