

**ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИ
ПОГРУЖЕННОГО АТОМА К
ЖИДКИМ МЕТАЛЛАМ.
УРАН**

Д. К. Белащенко, Д.Е. Смирнова

**Государственный технологический университет
«Московский институт стали и сплавов»**

ЦЕЛИ РАБОТЫ

- Применить метод молекулярной динамики и потенциал модели погруженного атома для расчета свойств жидкого урана.
- Разработать методику использования ударных адиабат для расчета свойств металлов (в том числе урана) в области экстремальных значений давления и температуры.

Модель погруженного атома (Embedded Atom Model - EAM)

- Потенциал EAM – это эффективный потенциал, изобретенный для молекулярного моделирования одноатомных металлических систем методами молекулярной динамики или Монте-Карло.
- Потенциал EAM является функцией координат атомов (ионов), он содержит обычный парный вклад и вклад, описывающий коллективное взаимодействие.
- Физическая природа вкладов в потенциал не требует рассмотрения в формализме EAM.
- Потенциал EAM применяется в аналитической форме с устанавливаемыми параметрами или в виде таблиц.

ЭНЕРГИЯ УРАНА В МОДЕЛИ ЕАМ

$$\begin{aligned} \bullet \quad U &= (3/2)RT + U_{\text{пот}} = U_{\text{ЕАМ}} + U_{\text{ЭЛ}} \\ &= (3/2)RT + \sum_i \Phi(\rho_i) + \sum_{i < j} \varphi(r_{ij}) + U_{\text{ЭЛ}} \\ \rho_i &= \sum_j \psi(r_{ij}) \end{aligned}$$

$\Phi(\rho)$ – потенциал погружения, $\varphi(r)$ – парный потенциал, $\psi(r)$ – «эффективная электронная плотность», $U_{\text{эл}}$ - электронный вклад.

Допущение: вклад $U_{\text{эл}}$ не зависит от объема и не влияет на давление системы

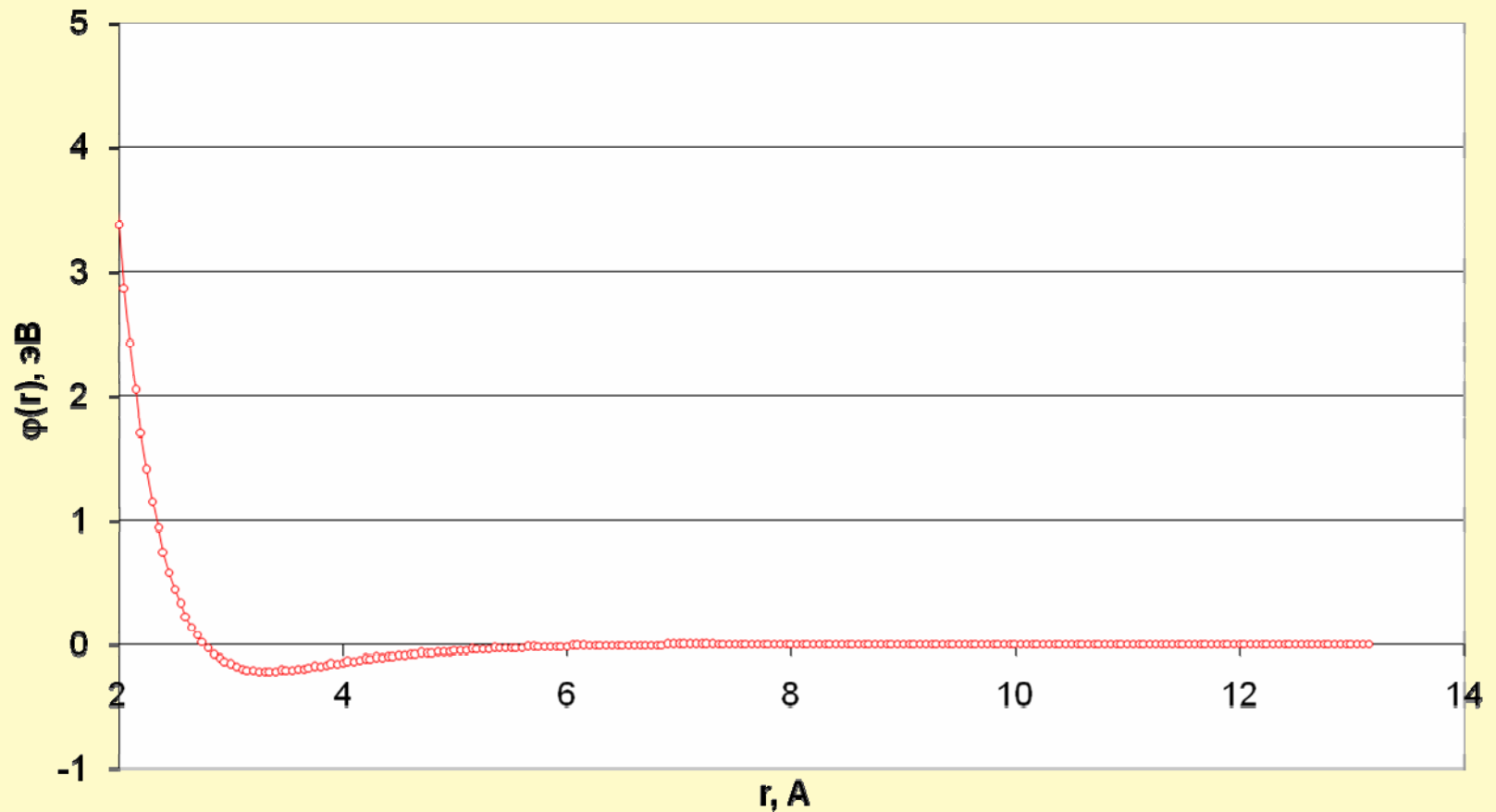
ПАРНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ МОРСА

- $\varphi_M(r) = \varepsilon [e^{-2\alpha(r/d - 1)} - 2e^{-\alpha(r/d - 1)}]$

$$\varepsilon = 0.209 \text{ эВ}, \quad d = 3.3318 \text{ \AA}, \quad \alpha = 4.100$$

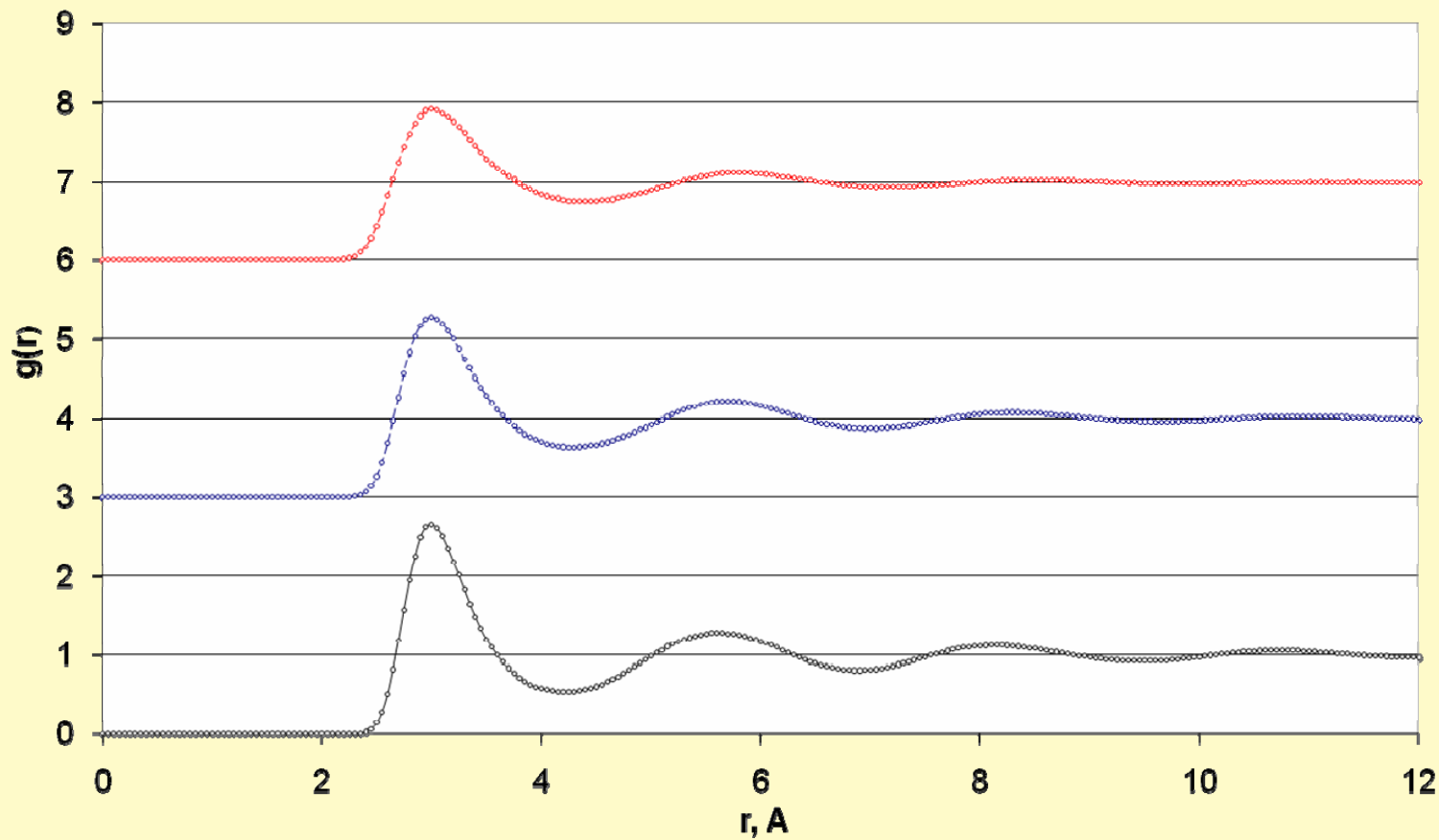
$$\rho_1 = r_1 (\text{N/V})^{1/3} = 1.073$$

ПАРНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ МОРСА



ПКФ урана

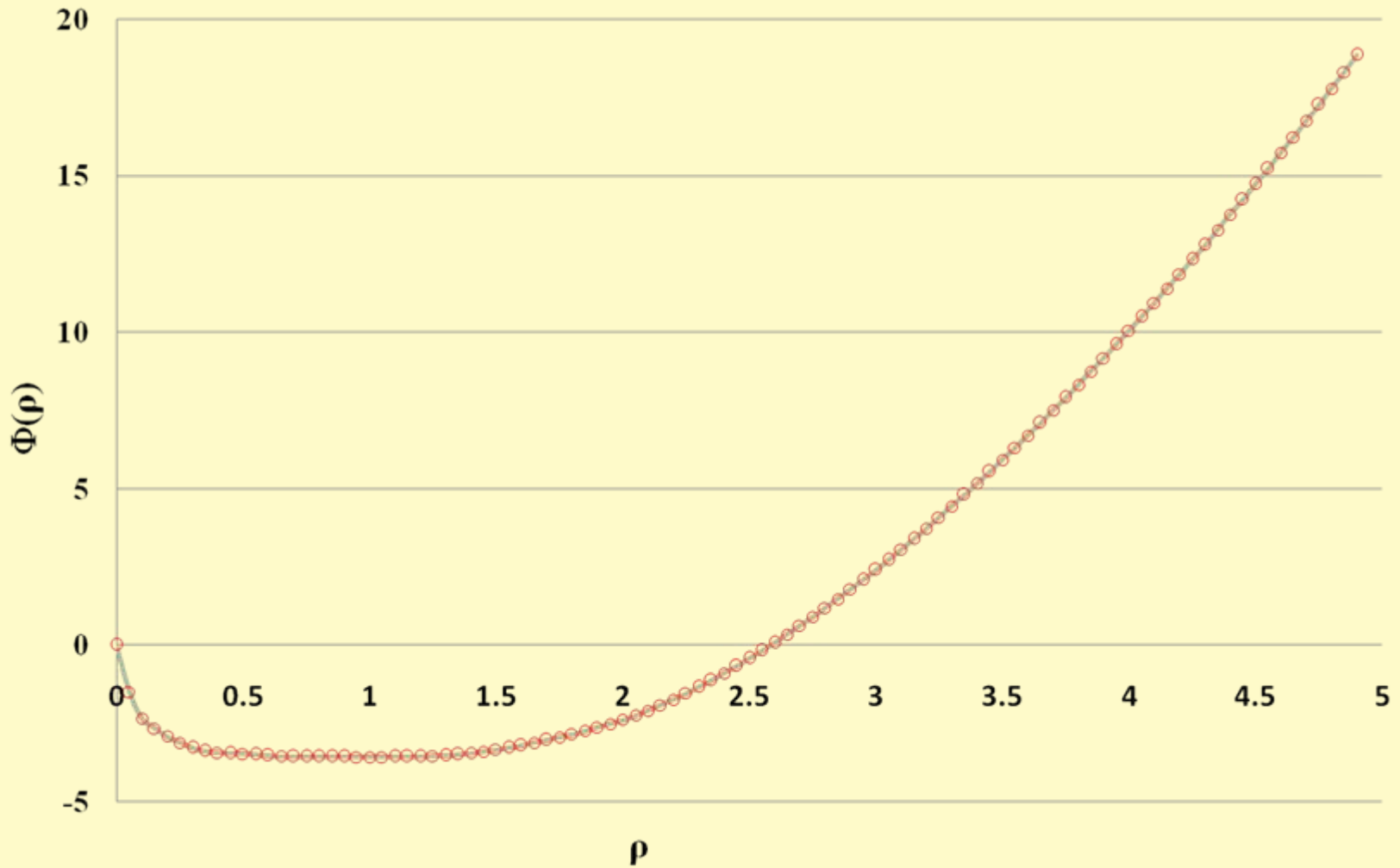
при 1406, 2000 и 3000 К



ЭНЕРГИЯ ПОГРУЖЕНИЯ ЕАМ

- $\psi(r) = p_1 \exp(- p_2 r)$
- $\Phi(\rho) = a_1 + c_1 (\rho - \rho_0)^2$ при $\rho_1 < \rho < \rho_6$
- $\Phi(\rho) = a_i + b_i (\rho - \rho_{i-1}) + c_i (\rho - \rho_{i-1})^2$
при $\rho_i < \rho < \rho_{i-1}$ ($i = 2-7$)
- $\Phi(\rho) = [a_8 + b_8(\rho - \rho_7) + c_8(\rho - \rho_7)^2]$ при $\rho < \rho_7$
 $\Phi(\rho) = a_9 + b_9(\rho - \rho_8) + c_9 (\rho - \rho_8)^m$
при $\rho_8 \leq \rho \leq \rho_9$,
- $\Phi(\rho) = a_{10} + b_{10}(\rho - \rho_9) + c_{10} (\rho - \rho_9)^n$ при $\rho \geq \rho_9$

ПОТЕНЦИАЛ ПОГРУЖЕНИЯ



ВКЛАД $U_{\text{эл}}$

$$U_{\text{эл}} = 2.239407 \cdot 10^{-6} T^2 + 8.016103 \cdot 10^{-3} T + 1.2856 \text{ kJ/mol}$$

Нормировка: $U_{\text{эл}} = 0$ при $T = 298 \text{ K}$

Расчетные свойства урана при $p \cong 0$

Т, К	d, г/см ³ [6]	P, ГПа		U, кДж/моль				K _T , ГПа	
		ЕАМ	Эксп	-U _{ЕАМ}	U _{el}	U _{ЕАМ} + U _{el}	U _{эксп}	ЕАМ	Опыт
298	19.05	-0.295	~0	526.46	0.0	-526.46	-526.8	-	100
298	19.14	0.002	~0	526.58	0.0	-526.58	-526.8	64.2	-
1406	17.226	0.001	~0	486.07	16.60	-469.10	-469.5	34.4	34.4
1500	17.06	-0.010	~0	482.87	18.12	-464.52	-464.8	31.7	-
2000	16.18	-0.014	~0	466.43	26.52	-440.16	-439.9	22.8	-
2500	15.33	0.055	~0	450.54	35.65	-415.22	-414.9	18.7	-
3000	14.53	0.018	~0	435.51	45.67	-390.02	-389.8	17.3	-
3500	13.76	-0.014	~0	420.25	56.71	-363.48	-363.5	14.8	-

САМОДИФФУЗИЯ И ВЯЗКОСТЬ

Т, К	d, г/см ³	D·10 ⁵ , см ² /с	Вязкость, спуаз	
			По С-Э	эксп
1406	17.226	1.99	6.59	6.59 8.75
1500	17.06	2.25	6.16	-
2000	16.18	5.06	3.65	3.90
2500	15.33	7.95	2.91	-
3000	14.53	11.1	2.50	2.06
3500	13.76	15.7	2.06	-
4000	13.03	19.3	1.92	1.50
4500	12.3	24.7	1.87	-
5000	11.7	28.8	1.60	-
6000	10.4	43.7	1.27	-
7000	9.2	73.2	-	-

САМОДИФФУЗИЯ И ВЯЗКОСТЬ

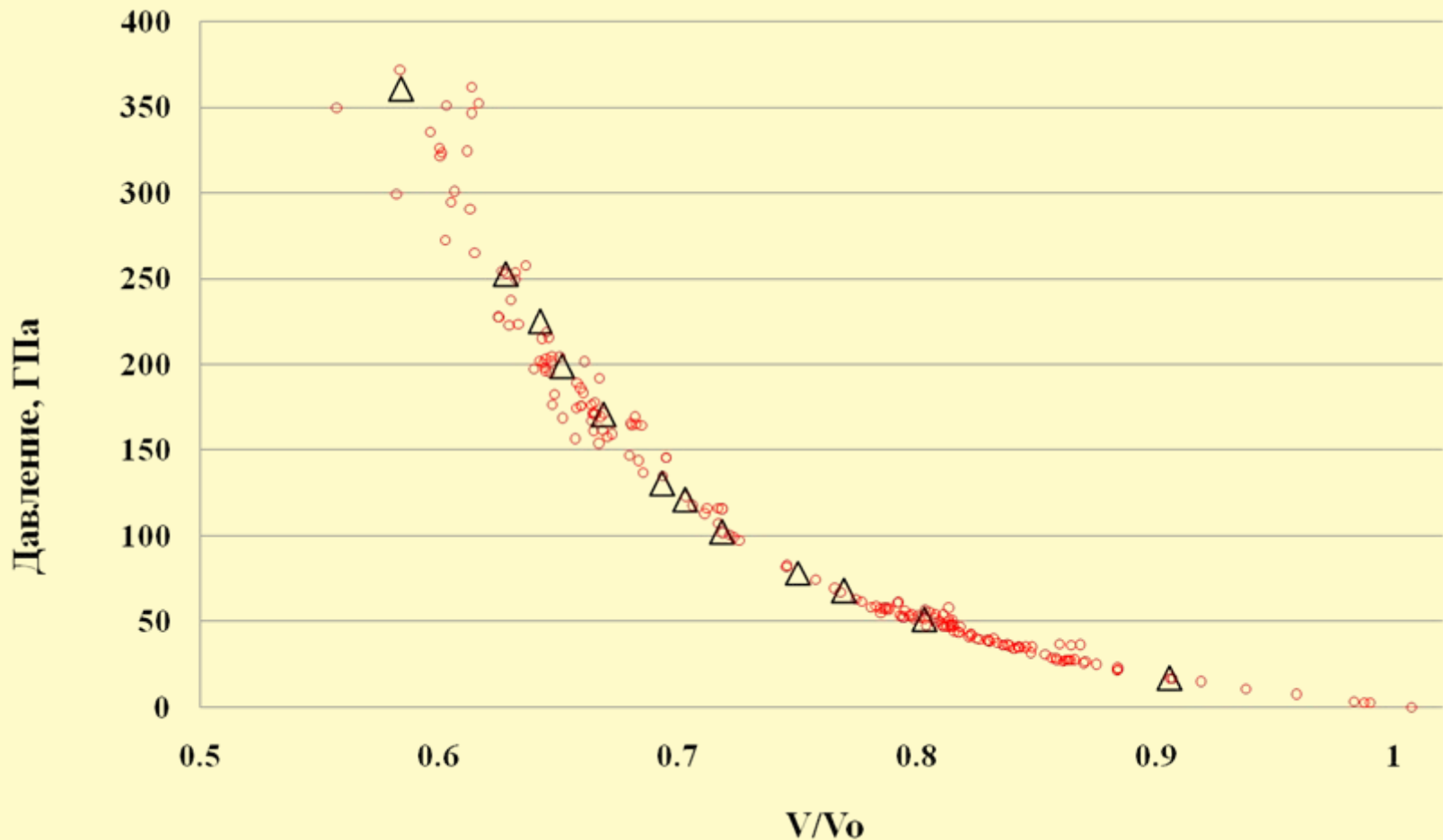
$$D, \text{ см}^2/\text{с} = 5.17 \cdot 10^{-12} T^{2.1029}$$

$$D = \frac{kT}{6\pi\eta r_a}$$

$$r_a = 0.792 \text{ \AA}$$

УДАРНАЯ АДИАБАТА

LASL Shock Hugoniot Data. // Ed. S. P. Marsh-Berkeley: Univ. California Press, 1979. 672 p.
van Thiel M. (Ed). Compendium of Shock Wave Data. Livermore: Lawrence Livermore
Laboratory Report UCRL-50108, 1977). P. 284-288. Δ - наш расчет методом молекулярной
динамики.



ПОТЕНЦИАЛ ЕАМ В СЖАТЫХ СОСТОЯНИЯХ

Критерии адекватности потенциала:

- 1) близость расчетного давления модели к найденному на ударной адиабате,
- 2) хорошая выполнимость соотношения для ударной волны:

$$U_2 - U_1 = (1/2)(p_1 + p_2)(V_1 - V_2)$$

V_1 , p_1 и U_1 – мольный объем, давление и энергия вещества перед фронтом ударной волны, а величины с индексом 2 – те же свойства за фронтом.

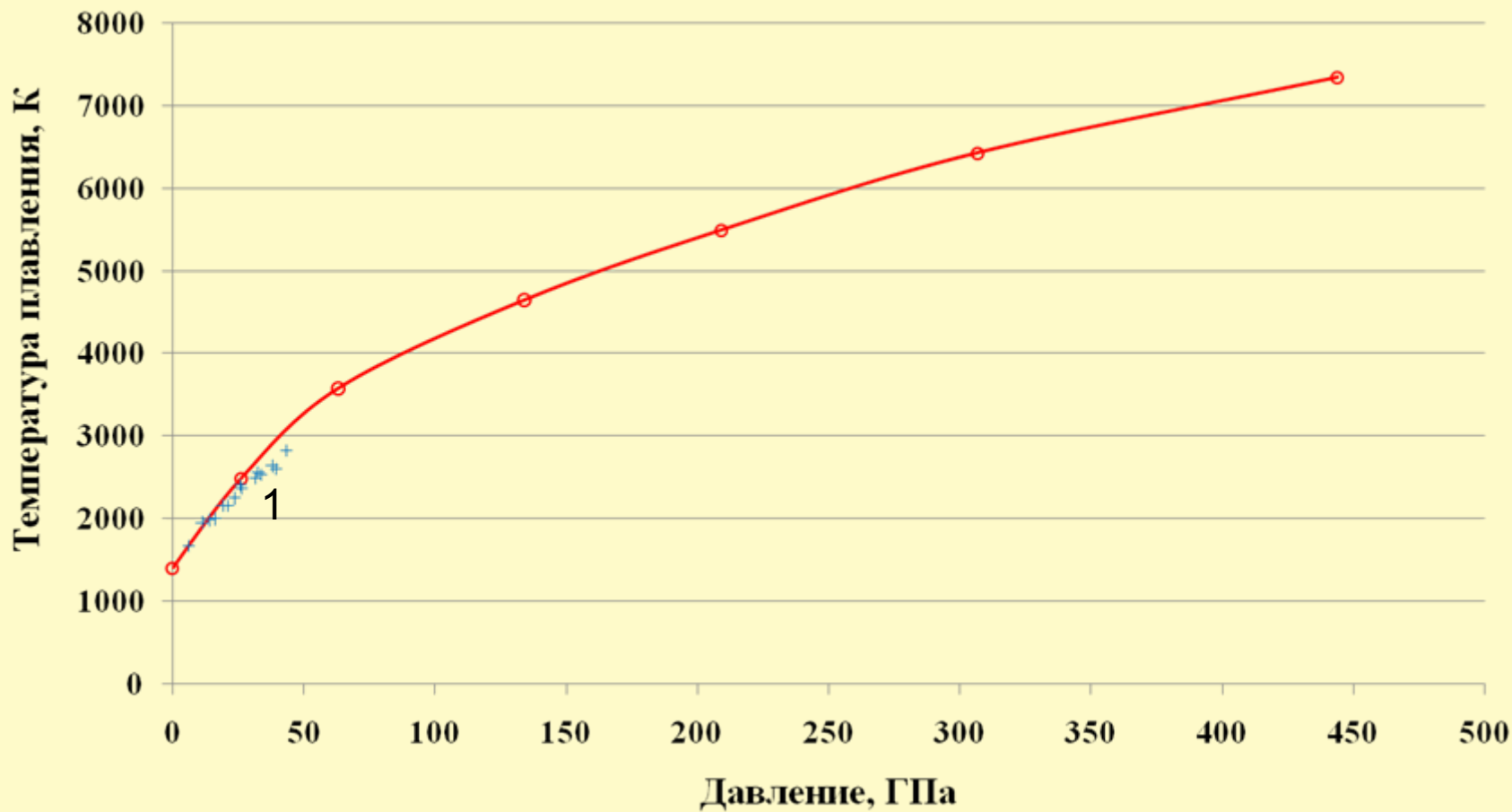
ДАВЛЕНИЕ МОДЕЛЕЙ УРАНА, ГПа

Затемнены кристаллические состояния

Т, К	$Z = V/V_0$					
	0.9	0.8	0.7	0.65	0.6	0.55
300	16.31	49.35	110.1	183	277.3	407.2
1000	18.86	51.86	113	186	280.3	410.2
2000	24.78	55.54	118	190.3	284.5	414.6
3000	29.03	59.47	123.1	194.6	288.9	418.9
4000	32.99	64.49	128.2	199.1	293.3	423.3
5000	36.11	70.53	135.8	203.8	297.7	427.8
6000	39.09	73.87	143.8	214.3	302.8	432.4
7000	42.05	77.03	148	219.1	313.5	437.4
8000	44.43	79.67	152.3	223.5	318.5	444.6
9000	46.71	82.99	156.3	227.1	322.3	454.1
10000	49.44	85.57	160	231.2	326.4	458.7
11000	51.49	88.46	164	234.8	330.2	462.9
12000	53.67	90.89	167.2	237.8	334	466.7

ТЕМПЕРАТУРА ПЛАВЛЕНИЯ УРАНА

1. Yoo C.S., Akella J., Moriarty J.A. // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. No 21. P. 15529.



«ХОЛОДНОЕ ДАВЛЕНИЕ»

18. *Жарков В.Н., Калинин В.А.* Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М.: Наука. 1968 г. 215 с.

$Z = V/V_0$	U, кДж/моль при T = 0	p, ГПа	
		EAM, T = 0 K	По [18]
0.980	-534.06	$\cong 0$	0
0.900	-527.75	15.18	19.0
0.800	-490.08	48.22	46.9
0.700	-395.87	109.0	107.8
0.653	-314.31	176.7	153.0
0.637	-276.31	203.9	168.8
0.628	-252.45	220.1	184.3

ВЫВОДЫ

- Рассчитан потенциал ЕАМ для жидкого урана.
- Рассчитаны свойства жидкого урана вдоль изобары $p \cong 0$ до температуры 7000 К.
- Проведены расчеты потенциала ЕАМ по данным ударного сжатия (при давлениях до 250 ГПа).
- Рассчитаны свойства урана при давлениях до 467 ГПа и температурах до 12000 К.
- В исследованном диапазоне параметров модель Грюнайзена дает неплохие результаты.
- Предложенный метод молекулярно-динамического расчета позволяет использовать ударные адиабаты для определения расчетов термодинамических свойств металлов в экстремальных условиях.