

ТЕРМОДИНАМИКА НЕМОЛЕКУЛЯРНОГО АЗОТА ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ И ПЛОТНОСТЯХ

Е.С.Якуб¹, Л.Н.Якуб²

¹*Одесский государственный экономический университет (ОГЭУ)*

²*Одесская государственная академия холода (ОГАХ)*

Экспериментальные исследования (как ударно-волновые, так и статические) обнаруживают необычное поведение ударных адиабат и кривой плавления сильно сжатого азота при мегабарных давлениях, которое интерпретируется как превращение молекулярного азота в немолекулярные (атомарные или полимерные) фазы. Неэмпирические расчеты предсказывают полиморфизм азота при высоких давлениях и наличие фазовых переходов первого рода в твердом и жидком состоянии. В данной работе мы показываем возможность микроскопического описания взаимодействия атомов азота и расчета термодинамических функций его немолекулярных фаз используя обычный метод Монте-Карло.