Линия единичного фактора сжимаемости для некоторых металлов

Апфельбаум Е.М., Воробьев В.С.

Объединённый Институт Высоких Температур РАН, г. Москва, Россия, apfel\_e@mail.ru

Показано, что свойство линейности для линии единичного фактора сжимаемости (Zeno line-ZL) также подтверждается для жидкой фазы металлов Mg, Ca, Sr, Ba [1], Al, Cu, and U [2]. Для описания взаимодействия между частицами использовался потенциал погруженного атома (Embeded atomic potential-EAM). Численное моделирование осуществлялось с помощью метода Монте-Карло в каноническом ансамбле. Были найдены параметры ZL и установлена ее линейность на плоскости плотность-температура. Также были построены бинодали для этих металлов, согласующиеся в своих низкотемпературных частях с экспериментальными данными. Были также проверены ранее установленные соотношения между критическими и ZL параметрами и найдено, что они выполняются в пределах ошибки измерения экспериментальных данных для всех указанных выше металлов, кроме урана. Для последнего возникает противоречие между расчетными и экспериментальными данными.

Литература

1. Apfelbaum E. M., Vorob’ev V. S.// Journal of Molecular Liquids.(2016), <http://dx.doi.org/10.1016/j.molliq.2016.10.070>
2. Apfelbaum E. M., Vorob’ev V. S.// Journal of Physical Chemistry B. V. 120 (21). (2016). PP. 4828 – 4833.