

УДК 539.21

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ О МГНОВЕННО-НОРМАЛЬНЫХ МОДАХ ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕПЛОЕМКОСТЕЙ ЖИДКИХ МЕТАЛЛОВ ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

© 2024 г. Э. В. Усов

ФГБУН Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, Новосибирск, Россия

E-mail: usovev@gmail.com

Поступила в редакцию 14.12.2023 г.

После доработки 15.01.2024 г.

Принята к публикации 14.02.2024 г.

В работе на основе представления о мгновенно-нормальных колебательных модах предложена простая полуэмпирическая формула для расчета теплоемкости жидкостей. Проведено сравнение результатов расчета и экспериментальных данных по теплоемкости натрия, свинца и висмута. Показано, что формулы позволяют проводить оценку свойств в области высоких температур с удовлетворительной точностью.

DOI: 10.31857/S0040364424020061

ВВЕДЕНИЕ

Основным направлением развития ядерной энергетики является строительство реакторов на быстрых нейтронах с жидкометаллическими теплоносителями (ЖМТ) — натрием и свинцом. Для проведения расчетных исследований особенностей протекания тяжелых аварий в реакторных установках с ЖМТ требуется знание свойств теплоносителей в области высоких температур (~2000–3000 К), характерных для аварий с разрушением активной зоны. Зачастую измерение свойств при высоких температурах сопряжено с большими трудностями из-за отсутствия надежных методик и материалов, способных выдерживать высокие нагревы. По этой причине требуется развитие полутеоретических подходов, которые позволили бы предсказывать свойства ЖМТ в области высоких температур.

Определение теплоемкости для жидкости является сложной задачей по сравнению с газами и твердыми кристаллическими веществами, так как для газов и кристаллов можно в качестве нулевого приближения использовать либо модель невзаимодействующих атомов (идеальный газ), либо модель идеального кристалла вместе с предположением о малости смещения атомов относительно положения равновесия и осцилляционном характере их движения. Дальнейший анализ теплофизических свойств сводится к определению поправок к нулевому приближению. Для жидкости же нельзя пренебречь взаимодействием

атомов между собой, как в газе, а ее структура и движение атомов не обладают регулярностью, как у кристалла. Поэтому для жидкости требуется развитие иных, более сложных подходов.

Как было указано в [1], в жидкостях движение атомов имеет “кочующий” характер. Предложенный способ микроскопического рассмотрения жидкостей был назван дырочной теорией из-за того, что при микроскопическом рассмотрении подобный характер движения молекул выглядит как перемещение дырок — областей, не занятых молекулами. Время оседлой жизни молекул в этой теории носит название времени релаксации. Молекулы в течение конечного времени совершают колебания относительно положения равновесия, как в кристалле, после чего перепрыгивают в новое положение равновесия. На основе подобных представлений в [1] был предложен способ расчета теплоемкости C_p :

$$C_p \sim (U/T)^2 e^{-U/T}. \quad (1)$$

Здесь U — высота потенциального барьера (энергия активации), T — абсолютная температура.

Применение данной формулы не позволяет удовлетворительно описать зависимость теплоемкости от температуры, так как в соответствии с (1) теплоемкость падает существенно быстрее, чем наблюдается в эксперименте. Для примера на рис. 1 приведен график сравнения экспериментальных данных для свинца и результатов расчетов по дырочной теории Я.И. Френкеля.

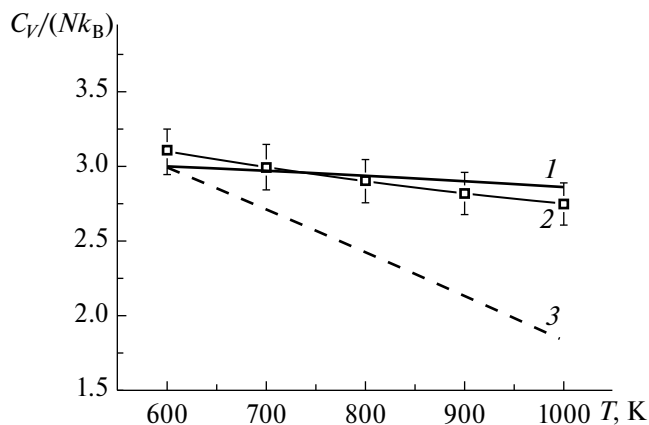


Рис. 1. Сравнение экспериментальных данных по теплоемкости свинца с результатами, полученными по предложенной формуле: 1 – расчет, 2 – эксперимент [14, 16], 3 – результаты расчета с использованием дырочной теории Френкеля [1].

В работах [2–4] представлен подход для расчета теплоемкости жидкостей на основе модели Дебая с учетом того, что жидкость ведет себя подобно кристаллу на малых временных интервалах. Используя эту гипотезу, авторы [2–4] представили способ расчета теплоемкости жидкости, отличающийся от модели Дебая [5] гипотезой о том, что в жидкости существуют только такие продольные звуковые волны, в которых период колебаний меньше времени релаксации τ_f , т.е. волны, частота которых ω меньше частоты Френкеля ω_f :

$$\omega > \omega_f = \frac{2\pi}{\tau_f}.$$

В этом предположении была получена следующая формула для внутренней энергии [2]:

$$\bar{E}_V = k_B T N \left(1 + \frac{\alpha_T T}{2} \right) \left(3 D \left(\frac{\hbar \omega_D}{k_B T} \right) - \left(\frac{\omega_f}{\omega_D} \right)^3 D \left(\frac{\omega_f}{\omega_D} \right) \right),$$

где α_T – коэффициент, по порядку равный коэффициенту объемного термического расширения; ω_D – частота Дебая; k_B – постоянная Больцмана; $D(x)$ – функция Дебая; N – число атомов. Время релаксации может быть оценено по соотношению Максвелла [1]

$$\tau_f = \mu / G_\infty,$$

где μ – динамическая вязкость жидкости; G_∞ – модуль сдвига для волн с частотой, стремящейся к бесконечности.

Недостатком предложенного подхода является наличие параметров ω_f , ω_D , которые должны подбираться, исходя из условий наилучшего совпадения расчетной формулы и результатов экс-

перимента. Кроме того, модифицированная теория Дебая [2–4] требует не только энергии активации U , но и динамической вязкости во всем требуемом диапазоне температур. Развитые в рамках настоящей работы подходы свободны от данного недостатка.

Многообещающими выглядят подходы на основе сочетания методов молекулярной динамики и нейросетевых методов. Так, в работе [6] сочетание двух этих подходов позволило рассчитать вязкость жидкого галлия с точностью в несколько процентов. Применение нейросетевого программирования к предсказанию тепловых свойств жидких металлов по всей видимости находится в процессе развития.

В [7, 8] на основе представлений о мгновенно-нормальных модах, развитых в работах [9–13], предложено соотношение для расчета теплоемкости жидкости на основе выведенного соотношения для нормированной плотности мгновенно-нормальных мод $g_{INM}(\omega)$:

$$C_V = k_B \int_0^\infty \frac{\left(\frac{\hbar \omega}{2 k_B T} \right)^2}{sh^2 \left(\frac{\hbar \omega}{2 k_B T} \right)} g_{INM}(\omega) d\omega, \quad (2)$$

$$\int_0^\infty g_{INM}(\omega) d\omega = 3 N. \quad (3)$$

Недостатком предложенных соотношений является то, что (2), (3) при высоких температурах стремится к закону Дюлонга–Пти

$$C_V = 3 N k_B,$$

чего не наблюдается для жидких металлов [14–20], представляющих большой практический интерес из-за широкого применения в перспективных реакторных установках.

Основной целью настоящей работы является получение на основе представления о мгновенно-нормальных модах простой экстраполяционной формулы для расчета теплоемкости жидких металлов при высоких температурах.

ПОНЯТИЕ О МГНОВЕННО-НОРМАЛЬНЫХ МОДАХ И ИХ ВКЛАДЕ ВО ВНУТРЕНнюю ЭНЕРГИЮ

Используя представления о мгновенно-нормальных модах, модифицируем формулу для расчета теплоемкости при постоянном объеме, которая обладала бы корректным поведением при высоких температурах, а именно, монотонным уменьшением с ростом температуры.

Для этого рассмотрим потенциальную энергию системы U :

$$U = \sum_i U(R_{i0}) + \frac{\partial U}{\partial R_i} (R_i - R_{i0}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial R_i \partial R_j} (R_i - R_{i0})(R_j - R_{j0}).$$

Здесь R_i — координаты частиц системы, R_{i0} — координаты частиц в положении равновесия. Введем обозначения $\frac{\partial^2 U}{\partial R_i \partial R_j} = D_{ij}$, $\sum_i U(R_{i0}) = U_0$ и учтем, что $\frac{\partial U}{\partial R_i} = 0$, тогда

$$E = U_0 + \sum_i \frac{m\dot{R}_i^2}{2} + \sum_{i,j} \frac{1}{2} D_{ij} (R_i - R_{i0})(R_j - R_{j0}) = U_0 + \sum_i \frac{m\dot{r}_i^2}{2} + \sum_{i,j} \frac{1}{2} D_{ij} r_i r_j. \quad (4)$$

Здесь m — масса атома, $r_i = R_i - R_{i0}$.

Так как $\mathbf{D}$ — симметричная матрица, существует такое ортогональное преобразование $\mathbf{V}$, которое приводит матрицу $\mathbf{D}$ к диагональному виду с собственными числами λ :

$$\mathbf{V}^T \mathbf{D} \mathbf{V} = \Lambda.$$

Собственные векторы матрицы $\mathbf{D}$:

$$\mathbf{V}^T \mathbf{r} = \alpha.$$

Тогда (4) можно привести к виду

$$E = \sum_i \frac{m\dot{\alpha}_i^2}{2} + \sum_i \frac{1}{2} \lambda_i \alpha_i^2.$$

В представленном выражении учтено, что внутренняя энергия определяется с точностью до константы, поэтому U_0 опущено.

Положительные собственные числа матрицы $\mathbf{D}$ ($\lambda \geq 0$) обозначим $m\omega_i^2$. Отрицательные собственные числа матрицы $\mathbf{D}$ ($\lambda < 0$) представим как $-m\Omega_i^2$. Собственные векторы, отвечающие заданным собственным числам (моды), называются мгновенно-нормальными (далее просто “нормальные”) модами. Моды с положительными собственными числами считаются стабильными, они соответствуют гармоническим колебаниям с частотами ω_i^2 . Моды с отрицательными собственными числами нестабильные, они соответствуют решениям с растущей по модулю амплитудой с характерным временем Ω_i^{-1} . Полное число мод — $3N$.

Так, полная энергия системы:

$$E = \sum_{i=1}^k \left\langle \frac{m\dot{\alpha}_i^2}{2} + \frac{1}{2} m\omega_i^2 \alpha_i^2 \right\rangle + \sum_{i=k+1}^{3N} \left\langle \frac{m\dot{\alpha}_i^2}{2} - \frac{1}{2} m\Omega_i^2 \alpha_i^2 \right\rangle,$$

скобки обозначают осреднение по всем возможным конфигурациям системы.

Рассмотрим вклад каждого типа моды. Запишем уравнения движения для каждой моды:

$$\begin{cases} m \frac{d^2 \alpha_i}{dt^2} = -m\omega_i^2 \alpha_i, & i = 1 \dots k; \\ m \frac{d^2 \alpha_j}{dt^2} = m\Omega_j^2 \alpha_j, & j = k+1 \dots 3N. \end{cases}$$

Решение уравнений имеет вид

$$\begin{cases} \alpha_i = \alpha_{i1} \cos(\omega_i t + \phi_i), & i = 1 \dots k, \\ \alpha_j = \alpha_{j1} \text{ch}(\Omega_j t) + \alpha_{j2} \text{sh}(\Omega_j t), & j = k+1 \dots 3N. \end{cases} \quad (5)$$

Отсюда после преобразований:

$$E = \sum_{i=1}^k \left\langle \frac{m\omega_i^2 \alpha_{i1}^2}{2} \right\rangle + \sum_{i=k+1}^{3N} \left\langle \frac{m\Omega_i^2}{2} (-\alpha_{i1}^2 + \alpha_{i2}^2) \right\rangle = \sum_{i=1}^k \frac{m\omega_i^2 \langle \alpha_{i1}^2 \rangle}{2} + \sum_{i=k+1}^{3N} \frac{m\Omega_i^2}{2} \langle (-\alpha_{i1}^2 + \alpha_{i2}^2) \rangle. \quad (6)$$

Так как все α_{i1} , α_{i2} равновероятны между собой $\langle \alpha_{i1}^2 \rangle = \langle \alpha_{i2}^2 \rangle$, каждое слагаемое в последнем члене в (6) равно нулю, т.е. энергия системы соответствует

$$E = \sum_{i=1}^k \frac{m\omega_i^2 \langle \alpha_{i1}^2 \rangle}{2}.$$

Таким образом, ненулевой вклад во внутреннюю энергию вносят только стабильные колебательные моды, вклады нестабильных мод для каждой частоты компенсируются. Поэтому для расчета термодинамических потенциалов могут быть использованы стандартные подходы, развитые для случая твердого тела. Суммирование при этом должно выполняться только для стабильных мод.

Представляя каждую колебательную моду в виде гармонического осциллятора с соответствующими частотой ω_i и спектром, получаем

$$\begin{aligned}\varepsilon(\omega_i) &= \hbar\omega_i \left(0.5 + \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_i}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1} \right) = \\ &= \left(\frac{\hbar\omega_i}{2} \right) \text{cth}\left(\frac{\hbar\omega_i}{2k_B T}\right).\end{aligned}$$

Тогда полная энергия – сумма всех стабильных мод [5]

$$E = \int_0^\infty \text{cth}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right) g_s(\omega) d\omega. \quad (7)$$

В последнем выражении выполнен переход от суммирования к интегрированию по всем стабильным модам. Здесь $g_s(\omega)$ – плотность стабильных нормальных мод. В случае, если рассматривается дискретный набор частот:

$$g_s(\omega) = \sum_{i=1}^k \delta(\omega - \omega_i),$$

где $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака.

По аналогии введем плотность нестабильных мод

$$g_u(\omega) = \sum_{i=k+1}^{3N} \delta(\omega + \Omega_i),$$

тогда полная плотность мгновенно-нормальных мод

$$\begin{aligned}g(\omega) &= \sum_{i=1}^k \delta(\omega - \omega_i) + \sum_{i=k+1}^{3N} \delta(\omega + \Omega_i) = \\ &= g_s(\omega) + g_u(\omega).\end{aligned}$$

Плотность мод связана с плотностью собственных чисел (квадратов частот) симметричной матрицы $\mathbf{D}$

$$\begin{aligned}G(\lambda = m\omega^2) &= G(\omega^2) = \\ &= \sum_{i=1}^k \delta(\omega^2 - \omega_i^2) + \sum_{i=k+1}^{3N} \delta(\omega^2 + \Omega_i^2)\end{aligned}$$

следующим соотношением:

$$g(\omega) = 2\omega G(\omega^2).$$

В общем случае число стабильных мод зависит от температуры, поэтому теплоемкость при постоянном объеме должна вычисляться следующим образом:

$$\begin{aligned}C_V &= k_B \int_0^\infty \frac{\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)^2}{\text{sh}^2\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)} g_s(\omega) d\omega + \\ &+ \int_0^\infty \text{cth}\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right) \frac{\partial g_s}{\partial T} d\omega.\end{aligned} \quad (8)$$

Представленное соотношение отличается от стандартных наличием производных по температуре от плотности стабильных мод.

РАСЧЕТ ТЕПЛОЕМКОСТИ ПО ПЛОТНОСТИ СТАБИЛЬНЫХ МОД ДЛЯ НЕКОТОРЫХ ПРЕДЕЛЬНЫХ СЛУЧАЕВ

Соотношения (8) имеют наиболее общий вид и подходят для расчета свойств как твердых тел, так и газов и жидкостей. Действительно, для случая твердого тела все частоты – стабильные, а плотность стабильных мод может быть рассчитана с помощью распределения Дебая

$$g_s(\omega, T) = g_s(\omega) = \begin{cases} 9N \frac{\omega^2}{\omega_D^3}, & \omega < \omega_D, \\ 0, & \omega \geq 0, \end{cases} \quad g_u(\omega) = 0.$$

В этом случае формула для расчета теплоемкости преобразуется в известную формулу [5] (здесь $D(x)$ – функция Дебая)

$$\begin{aligned}C_V &= k_B \int_0^\infty \frac{\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)^2}{\text{sh}^2\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)} g_s(\omega) d\omega = \\ &= 3Nk_B \left[D\left(\frac{T_D}{T}\right) - \left(\frac{T_D}{T}\right) D'\left(\frac{T_D}{T}\right) \right],\end{aligned}$$

из которой при высоких температурах следует закон Дюлонга–Пти

$$C_V = 3Nk_B.$$

Для одноатомного идеального газа плотность квадратов нормальных мод представима в виде

$$G(\omega^2) = \delta(\omega^2),$$

поэтому

$$g(\omega) = 2\omega\delta(\omega^2).$$

Плотность стабильных мод отвечает положительным частотам, нестабильных – отрицательным, поэтому

$$g_s(\omega) = 2\omega H(\omega)\delta(\omega^2), \quad g_u(\omega) = 2\omega H(-\omega)\delta(\omega^2),$$

где $H(\omega)$ – функция Хевисайда.

После интегрирования получаем

$$C_V = \left(\frac{3}{2}\right) Nk_B.$$

Для реального газа плотность мод имеет более сложный вид, но распределение собственных чисел матрицы $\mathbf{D}$ в приближении среднего поля

в случае, если элементы матрицы **D** слабокоррелированы, как показано в [9], стремятся к полукруговому распределению Вигнера. Данный случай реализуется при высоких температурах. Симметричное относительно нуля распределение собственных чисел матрицы **D** приводит также к закону $3/2$ для теплоемкости.

ОЦЕНКА ТЕПЛОЕМКОСТИ ПО ПЛОТНОСТИ СТАБИЛЬНЫХ МОД ДЛЯ ЖИДКОСТИ

Перейдем к оценке теплоемкости для жидких металлов при высоких температурах. У рассматриваемых жидкостей (свинец, натрий, висмут) температура плавления существенно выше температуры Дебая [10], и поэтому (7) при высоких температурах переходит в выражение

$$E = k_B T \int_0^{\infty} g_s(\omega) d\omega,$$

откуда теплоемкость

$$C_V = k_B \frac{d[TN_s(T)]}{dT}.$$

Здесь $\int_0^{\infty} g(\omega) d\omega = N_s(T)$ — число стабильных мод.

Так как полное число всех мод (стабильных и нестабильных) равно $3N$, то

$$\int_0^{\infty} g(\omega) d\omega = \int_0^{\infty} g_s(\omega) d\omega + \int_0^{\infty} g_u(\omega) d\omega = 3N.$$

Значит,

$$\begin{aligned} C_V &= k_B \left[3N - \frac{d(TN_s(T))}{dT} \right] = \\ &= 3Nk_B \left[1 - \frac{d}{dT} \left(T \frac{N_u(T)}{3N} \right) \right]. \end{aligned} \quad (9)$$

Таким образом, уменьшение теплоемкости для жидкостей при высоких температурах связано с появлением в спектре нестабильных мод $N_u(T)$ и, как следствие, с уменьшением числа стабильных мод. Данный факт согласуется с представлением работы [2], в которой уменьшение числа стабильных мод с ростом температуры интерпретируется как уменьшение числа поперечных звуковых колебаний.

В случае с металлами вклад в теплоемкость может вносить также электронный газ, но как показывают расчеты [5], теплоемкость электронного газа пропорциональна отношению температуры к температуре Ферми. Так как температура Ферми

для натрия $\sim 4 \times 10^4$ К, для свинца $\sim 1 \times 10^5$ К, то вклад электронного газа в теплоемкость чрезвычайно мал.

Наличие нестабильных мод в соответствии с (5) должно приводить к бесконечному росту отклонений от положения равновесия и, как следствие, к переходу частицы в новое положение равновесия. Характерное время роста отклонений для каждой нестабильной моды $\sim \frac{1}{\Omega_i}$. Ха-

рактерное время жизни атома в положении равновесия (время оседлой жизни) должно быть пропорционально средней частоте нестабильных мод $\frac{1}{\Omega}$. Время оседлой жизни атома пропор-

ционально $e^{\frac{U}{RT}}$, где U — высота потенциального барьера, или энергия активации, необходимая для перехода молекулы в новое положение равновесия [1]. Поэтому температурная зависимость средней частоты нестабильных мод должна иметь тот же функциональный вид:

$$\bar{\Omega} \sim e^{\frac{-U}{RT}}.$$

Характерное время оседлой жизни связано с вязкостью соотношением Максвелла

$$\tau_f = \frac{\mu}{G_{\infty}} \sim e^{\frac{U}{RT}}.$$

Поэтому высота потенциального барьера U может быть извлечена из данных о динамической вязкости.

Свяжем число нестабильных мод с их средней частотой. Для этого воспользуемся данными работы [13], в которой предлагается следующий вид функции распределения нестабильных мод:

$$g_u(\omega) \sim \omega \exp\left(-\frac{a\omega^2}{T}\right),$$

полученной на основании обработки данных молекулярного моделирования, поэтому число нестабильных мод

$$N_u(T) \sim \int_0^{\infty} \omega \exp\left(-\frac{a\omega^2}{T}\right) d\omega.$$

Отсюда получаем, что производная числа нестабильных мод по температуре пропорциональна квадрату средней частоты нестабильных мод:

$$\frac{d(TN_u)}{dT} \sim \int_0^{\infty} \omega^2 \omega \exp\left(-\frac{a\omega^2}{T}\right) d\omega \sim \bar{\Omega}^2 \sim \exp\left(-\frac{2U}{T}\right). \quad (10)$$

Тогда выражение для теплоемкости из (9) и (10) можно искать в виде

$$C_V(T) = 3Nk_B \left[C_1 - C_2 \exp\left(-\frac{2U}{T}\right) \right].$$

Для нахождения констант C_1 и C_2 привлечем дополнительные предположения, что в точке плавления число нестабильных мод еще очень мало и поэтому $C_V(T_m) = 3Nk_B$, а при очень высоких температурах, как было указано ранее, числа стабильных и нестабильных мод должны стать примерно равным и поэтому $C_V(\infty) = \left(\frac{3}{2}\right)Nk_B$.

Тогда получаем следующую простую интерполяционную формулу:

$$C_V = 3Nk_B \left[1 - \frac{1}{2} \frac{e^{-\frac{2U}{T}} - e^{-\frac{2U}{T_m}}}{1 - e^{-\frac{2U}{T_m}}} \right]. \quad (11)$$

Преимуществом данной формулы является то, что она построена без использования подгоночных параметров, на основании данных по величине энергии активации U , которая восстанавливается на основе данных о вязкости жидкости и данных по температуре плавления. По этой причине формула может использоваться для вычисления теплоемкости жидкостей при высоких температурах, при которых проведение измерений затруднительно. Недостатком формулы является неучет ангармонических поправок при расчете теплоемкости, что приводит к отклонению результатов расчетов по формуле (11) от экспериментальных данных.

СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАНЫМИ

Для сравнения результатов, получаемых по предложенной формуле, с экспериментальными данными выбраны жидкие металлы, представляющие наибольший практический интерес в качестве теплоносителей: свинец, натрий и висмут. Сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными приведено на рис. 1–3. Среднеарифметическая погрешность расчета по представленной формуле в сравнении с экспериментальными данными составила 7%. Максимальная погрешность расчетной формулы – 17%.

Данные по теплоемкости при постоянном объеме рассчитаны с использованием данных по изобарной теплоемкости, коэффициенту

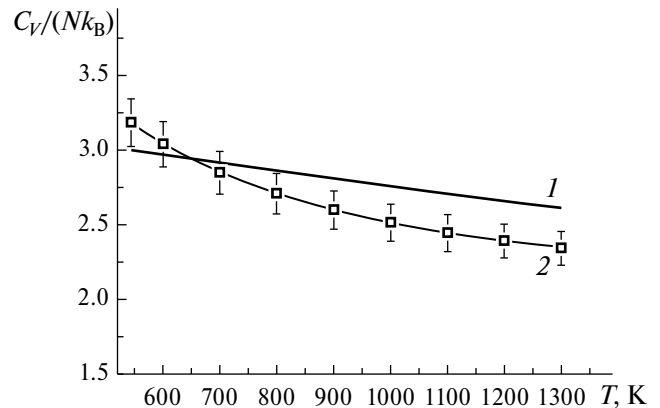


Рис. 2. Сравнение экспериментальных данных по теплоемкости висмута с результатами, полученными по предложенной формуле: 1 – расчет, 2 – эксперимент [20].

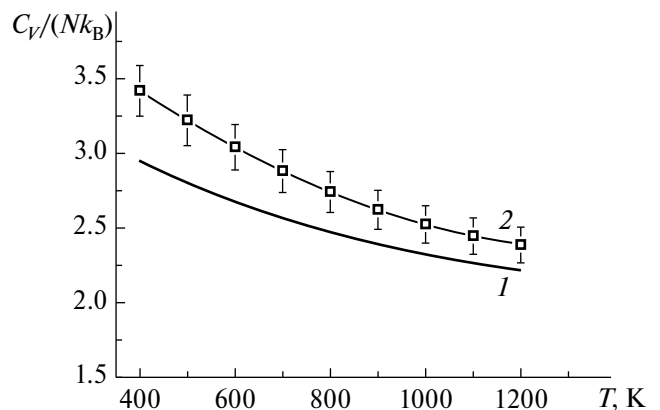


Рис. 3. Сравнение экспериментальных данных по теплоемкости натрия с результатами, полученными по предложенной формуле: 1 – расчет, 2 – эксперимент [20].

объемного термического расширения α_T , скорости звука c_s в соответствии с формулой

$$C_V = \frac{C_p^2}{(C_p + \alpha_T^2 T c_s^2)}.$$

Для свинца использовались наиболее надежные данные из [14, 18], для висмута – из [19], для натрия – из [20]. По этим же источникам из формул для динамической вязкости извлечены данные по величине U : для свинца $U = 1069$ К, для висмута – 780, для натрия – 557.

Как можно увидеть из рисунков, из-за неучета ангармонических эффектов теплоемкость, полученная по упрощенной формуле (11), отличается от экспериментальной, но при этом ошибка не превышает 20% во всем диапазоне температур, что является вполне удовлетворительным результатом.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе представлений о мгновенно-нормальных модах развит подход для расчета теплоемкости жидкости при высоких температурах.

Предложена простая формула для оценки теплоемкости жидких металлов, в которую входят только температура плавления и энергия активации, которая может быть извлечена из данных о вязкости жидкости.

Показано, что предложенная формула позволяет рассчитывать теплоемкость свинца, натрия и висмута с удовлетворительной точностью. Среднеарифметическая погрешность расчета составила 7%.

Исследование проведено в рамках госконтракта № Н.40.241.19.21.1068 от 14.04.2021 на выполнение научно-исследовательских работ по теме “Разработка интегрированных систем кодов нового поколения для разработки и обоснования безопасности ядерных реакторов, проектирования атомных электростанций, создания технологий и объектов ядерного топливного цикла. Этап 2021–2023 годов”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкости. Л.: Наука, 1975. 592 с.
2. Bolmatov D., Brazhkin V.V., Trachenko K. The Phonon Theory of Liquid Thermodynamics // Sci. Rep. 2012. V. 2. P. 421.
3. Brazhkin V.V., Trachenko K. Collective Excitations and Thermodynamics of Disordered State: New Insights into an Old Problem // J. Phys. Chem. B. 2014. V.118. P. 11417.
4. Trachenko K., Brazhkin V.V. Heat Capacity at the Glass Transition // Phys. Rev. B. 2011. V. 83. P. 014201.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Статистическая физика. Т. V. Ч. I. М.: Наука, 1976. 584 с.
6. Balyakin I.A., Yuryev A.A., Filippov V.V., Gelchinski B.R. Viscosity of Liquid Gallium: Neural Network Potential Molecular Dynamics and Experimental Study // Comput. Mater. Sci. 2022. V. 215. P. 111802.
7. Baggioli M., Zaccane A. Explaining the Specific Heat of Liquids Based on Instantaneous Normal Modes // Phys. Rev. E. 2021. V. 104. P. 014103.
8. Zaccane A., Baggioli M. Universal Law for the Vibrational Density of States of Liquids // PNAS. 2021. V. 118. № 5. P. e2022303118.
9. Xu B., Stratf R. Liquid Theory for Band Structure in a Liquid. II. p Orbitals and Phonons // J. Chem. Phys. 1990. V. 92. № 3. P. 1923.
10. Majumdar A. Microscale Energy Transport in Solids // Microscale Energy Transport. 1997. P. 23.
11. Balucani U., Zoppi M. Dynamics of the Liquid State. Oxford: Clarendon Press, 1994. 336 p.
12. Keyes T. Instantaneous Normal Mode Approach to Liquid State Dynamics // J. Phys. Chem. A. 1997. V. 101. P. 2921.
13. Vijayadamodar G.V., Nitzan A. On the Application of Instantaneous Normal Mode Analysis to Long Time Dynamics of Liquids // J. Chem. Phys. 1995. V. 103. P. 2169.
14. Савченко И.В., Лежнин С.И., Мосунова Н.А. Рекомендации по значениям и расчетным соотношениям для теплофизических и кинетических свойств жидкого свинца // Теплоэнергетика. 2015. № 6. С. 51.
15. Чусов И.А., Новиков Г.Е., Обысов Н.А., Проняев В.Г. Расчетные соотношения для определения термодинамических свойств свинцового теплоносителя // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов. 2019. № 2. С. 82.
16. Станкус С.В., Хайрулин А.Р., Яцук О.С. Энтальпия и теплоемкость свинца в конденсированном состоянии // Атомная энергия. 2023. Т. 134. № 3–4. С. 124.
17. Станкус С.В., Савченко И.В., Яцук О.С. Калорические свойства жидкого висмута // ТВТ. 2018. Т. 56. № 1. С. 30.
18. Савченко И.В., Прибатурин Н.А., Стрижов В.Ф., Мосунова Н.А., Лежнин С.И. Таблицы рекомендуемых справочных данных в области использования атомной энергии “Теплопроводность, температуропроводность, энтальпия, теплоемкость жидкого свинца в температурном интервале 630... 1300 К” и стандартных справочных данных в области использования атомной энергии “Плотность свинца в температурном интервале 273.15–1500 К”. РСДАЭ 1-2021. М. 2021. (инв. № 5469-Н.40.241.19.21.1068-3/СД по учету ИБРАЭ РАН).
19. Handbook on Lead–Bismuth Eutectic Alloy and Lead Properties, Materials Compatibility, Thermal-Hydraulics, and Technologies. OECD-NEA, 2015.
20. Fink J.K., Leibowitz L. Thermodynamic and Transport Properties of Sodium Liquid and Vapor. Report ANL/RE-95/2. Reactor Engineering Division. Argonne National Laboratory, 1995.