

ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ И ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ ГЕЛИЯ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ МЕТОДАМИ ТЕРМО- И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ*

Ю. А. Богданова¹, И. В. Маклашова², У. Д. Вагина³, В. А. Высоцкий⁴

Аннотация: С помощью молекулярной динамики исследовалось применение парного межатомного потенциала взаимодействия Леннарда–Джонса (ЛД) для гелия ^4He с целью изучения его структуры, фазового состояния и теплофизических свойств. Определены и верифицированы параметры парного межатомного потенциала взаимодействия ЛД на основе экспериментальных данных. Показано, что найденные параметры потенциала достоверно воспроизводят свойства ^4He в широкой области изменения давления и температуры, включая области твердого, жидкого и газообразного гелия. Рассчитаны свойства ^4He вдоль изотерм для температур от 20 до 3000 К. Проанализирована структура и фазовое состояние ^4He при повышенном давлении. Проведена оценка температуры плавления ^4He . Определено, что существует стабильная кристаллическая объемно-центрированная кубическая фаза для ^4He при температуре 300 К и давлении выше 16 ГПа.

Ключевые слова: молекулярная динамика; фазовая диаграмма; потенциал межмолекулярного взаимодействия; линия плавления; гелий

DOI: 10.30826/CE19120318

Литература

1. *De Boer, J. Michels A.* Contribution to the quantum-mechanical theory of the equation of state and the law of corresponding states. Determination of the law of force of helium // *Physica*, 1938. Vol. 5. No. 10. P. 945–957. doi: 10.1016/S0031-8914(38)80037-9.
2. *Гирифельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей / Пер. с англ. — М: ИЛ, 1961. 928 с. (*Hirschfelder J. O., Curtiss Ch. F., Bird R. B.* Molecular theory of gases and liquids. — New York, NY, USA: Wiley; London: Chapman & Hall, 1954. 1219 p.)
3. *Bruch L. W., McGee I. J.* Semiempirical potential and bound state of the helium-4 diatom // *J. Chem. Phys.*, 1967. Vol. 46. P. 2959–2967. doi: 10.1063/1.1841163.
4. *Beck D. E.* A new interatomic potential function for helium // *Mol. Phys.*, 1968. Vol. 14. P. 311–315. doi: 10.1080/00268976800100381.
5. *Bertoncini P., Wahl A. C.* *Ab initio* calculation of the helium–helium $\text{Ig}+1$ potential at intermediate and large separations // *Phys. Rev. Lett.*, 1970. Vol. 25. P. 991–994. doi: 10.1103/PhysRevLett.25.991.
6. *Farrar J. M., Lee Y. T.* Intermolecular potentials from crossed beam differential elastic scattering measurements. The attractive well of He_2 // *J. Chem. Phys.*, 1972. Vol. 56. P. 5801–5807. doi: 10.1063/1.1677119.
7. *Aziz R. A., Nain V. P. S., Carley J. S., Taylor W. L., McConville G. T.* An accurate intermolecular potential for helium // *J. Chem. Phys.*, 1979. Vol. 70. No. 9. P. 4330–4342. doi: 10.1063/1.438007.
8. *Богданова Ю. А., Губин С. А., Викторов С. Б., Губина Т. В.* Теоретическая модель уравнения состояния двухкомпонентного флюида с потенциалом Exp-6 на основе теории возмущений // *ТВТ*, 2015. Т. 53. № 4. С. 506–516.
9. *Варгафтик Н. Б.* Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. — М.: Наука, 1972. 720 с.
10. *Циклис Д. С.* Плотные газы. — М.: Химия, 1977. 168 с.
11. *Arp V. D., McCarty R. D., Friend D. G.* Thermophysical properties of helium-4 from 0.8 to 1500 K with pressures to 2000 MPa. NIST Technical Note 1334 (revised), 1998.
12. *Sullivan J. A., Sonntag R. E.* Compressibilities for helium at temperatures from 70 to 120 K and pressures to 690 atm // *Cryogenics*, 1967. Vol. 7. No. 1-4. P. 13–17. doi: 10.1016/S0011-2275(67)80007-9.
13. *Selezenev A. A., Aleynikov A. Yu., et al.* SageMD: Molecular-dynamic software package to study properties of materials with different models for interatomic interactions // *Comp. Mater. Sci.*, 2003. Vol. 28. P. 107–124.
14. *Grawford R. K., Daniels W. B.* Experimental determination of the P – T melting curves of Kr, Ne, and He //

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 16-19-00188).

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», bogdanova.youlia@bk.ru

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», ivmaklashova@mephi.ru

³Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», ulianavagina@gmail.com

⁴Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», vysotskiyev@yandex.ru

- J. Chem. Phys., 1971. Vol. 55. P. 5651–5656. doi: 10.1063/1.1675734.
15. Mills R. L., Liebenberg D. H., Bronson J. C. Equation of state and melting properties of ^4He from measurements to 20 kbar // Phys. Rev. B, 1980. Vol. 21. P. 5137–5148. doi: 10.1103/PhysRevB.21.5137.
 16. Franck J. P., Daniels W. B. Extension of the hcp-fcc ^4He phase diagram to about 9 kbar // Phys. Rev. Lett., 1980. Vol. 44. P. 259–262. doi: 10.1103/PhysRevLett.44.259.
 17. Loubeyre P., Besson J. M., Pinceaux J. P., Hansen J. P. High-pressure melting curve of ^4He // Phys. Rev. Lett., 1982. Vol. 49. No. 16. P. 1172–1175. doi: 10.1103/PhysRevLett.49.1172.
 18. Mao H. K., Hemley R. J., Wu Y., Jephcoat A. P., Finger L. W., Zha C. S., Bassett W. A. High-pressure phase diagram and equation of state of solid helium from single-crystal X-ray diffraction to 23.3 GPa // Phys. Rev. Lett., 1988. Vol. 60. No. 25. P. 2649–2652. doi: 10.1103/PhysRevLett.60.2649.
 19. LeToullec R., Loubeyre P., Pinceaux J. P., Hansen J. P. Refractive-index measurements of dense helium up to 16 GPa at $T = 298$ K: Analysis of its thermodynamic and electronic properties // Phys. Rev. B, 1989. Vol. 40. No. 4. P. 2368–2378. doi: 10.1103/PhysRevB.40.2368.
 20. Barrat J. L., Loubeyre P., Klein M. Isotopic shift in the melting curve of helium: A path integral Monte Carlo study // J. Chem. Phys., 1989. Vol. 90. P. 5644–5650. doi: 10.1063/1.456419.
 21. Datchi F., Loubeyre P., LeToullec R. Extended and accurate determination of the melting curves of argon, helium, ice (H_2O), and hydrogen (H_2) // Phys. Rev., 2000. Vol. 61. P. 6535–6546. doi: 10.1103/PhysRevB.61.6535.
 22. Ceperley D. M., Partridge H. The He_2 potential at small distances // J. Chem. Phys., 1986. Vol. 84. No. 2. P. 820–821. doi: 10.1063/1.450581.
 23. Chang S. Y., Boninsegni M. *Ab initio* potentials and the equation of state of condensed helium at high pressure // J. Chem. Phys., 2001. Vol. 115. P. 2629–2633. doi: 10.1063/1.1386657.
 24. Kočí L., Ahuja R., Belonoshko A. B., Johansson B. 2006. Study of the high-pressure helium phase diagram using molecular dynamics // J. Phys. Condensed Matter, 2006. Vol. 19. No. 1. P. 016206. doi: 10.1088/0953-8984/19/1/016206.
 25. Урлин В. Д. Уравнения состояния и фазовая диаграмма диэлектрического и металлического гелия-4 // ЖЭТФ, 2018. Т. 154. № 1(7). С. 141–151.
 26. Levesque D., Weis J.-J., Klein M. L. New high-pressure phase of solid ^4He is bcc // Phys. Rev. Lett., 1983. Vol. 51. P. 670–673. doi: 10.1103/PhysRevLett.51.670.

Поступила в редакцию 25.12.18