

# АТОМНАЯ ДИНАМИКА ЖИДКОГО КАЛИЯ И РАСПЛАВА КАЛИЙ-КИСЛОРОД ИЗ ДАННЫХ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО НЕУПРУГОМУ РАССЕЯНИЮ НЕЙТРОНОВ

И.Ю.Шимкевич, М.В.Заезжев, В.В.Кузин, А.Г.Новиков, В.В.Савостин, А.Л.Шимкевич

*ГНЦ РФ - Физико-энергетический институт им. А.И. Лейпунского, г. Обнинск*



В работе изложены алгоритм и процедура молекулярно-динамического (МД) моделирования расплавов чистого калия и системы калий-кислород, а также проведено сравнение этих данных с результатами экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов. Такой подход является наиболее эффективным методом исследования структурных и динамических свойств конденсированных сред на микроскопическом уровне.

## ВВЕДЕНИЕ

Расплавы щелочных металлов находят широкое применение в качестве теплоносителей ядерных энергетических установок [1]. На практике все они являются многокомпонентными растворами, так что вопросы коррозии конструкционных материалов и проблемы массопереноса становятся основными при разработке технологии щелочно-металлических теплоносителей [2]. Определяющую роль здесь играет кислород. Поэтому традиционная технология щелочных металлов основывается на глубокой очистке расплава от этой примеси, что не всегда удается сделать достаточно эффективно [3, 4]. В этой связи при разработке методов очистки щелочных металлов от кислорода важно иметь однозначное и достоверное представление о структурных и динамических свойствах двойных расплавов.

Между тем, теория и экспериментальные исследования примесного состояния кислорода в щелочных металлах не дают исчерпывающего ответа на вопрос о природе этого состояния, о формах существования кислорода в расплавах и о том, как это состояние меняется при изменении температуры и концентрации других примесей. Для ответа на поставленные вопросы, наряду с термодинамикой, необходимо исследовать раствор кислорода в щелочном металле на микроскопическом уровне, т.е. изучить как структуру бинарного расплава, так и движение атомов обеих компонент с помощью МД-моделирования двухкомпонентного раствора и рассеяния на нем медленных нейтронов.

Сравнение результатов молекулярно-динамического моделирования расплавов и

© *И.Ю. Шимкевич, М.В. Заезжев, В.В. Кузин, А.Г. Новиков, В.В. Савостин, А.Л. Шимкевич, 2000*

данных эксперимента по неупругому рассеянию нейтронов представляет особый интерес и может рассматриваться, как наиболее убедительный способ проверки физических моделей и математических процедур, используемых в МД-расчетах [5,6].

## МД-МОДЕЛИРОВАНИЕ

Благодаря адекватности молекулярно-динамических моделей реальным системам, МД-расчеты стали эффективным методом исследования жидких металлов [7].

Для изучения структурных и кинетических свойств расплава калия и системы калий-кислород разработан пакет расчетных программ [8], который позволяет построить модели одно-, двух- и трехкомпонентных неупорядоченных систем, исследовать атомные конфигурации с помощью многогранников Вороного [9].

МД-моделирование проводилось в рамках NVT ансамбля, когда число  $N$  атомов рассматриваемой системы при температуре  $T$  и заданной плотности частиц  $\rho$  определяют объем  $V = L^3$  кубической ячейки (с длиной ребра  $L$ ), на которую накладываются периодические граничные условия. Для решения уравнений движения используется алгоритм Верле. Начальная конфигурация частиц задается случайным размещением атомов в ячейке. Результатом моделирования такого типа является серия мгновенных «снимков» конфигурации частиц, отделенных друг от друга интервалом времени  $\Delta t$ . После выхода системы в равновесие каждая атомная конфигурация рассматривалась как микроканонический ансамбль для расчета термодинамических свойств исследуемой системы.

С помощью программного комплекса MOLDY [8] вычислялись радиальные функции распределения  $g_{\alpha\beta}(r)$   $\beta$ -атомов около  $\alpha$ -атомов и соответствующие им структурные факторы  $S_{\alpha\beta}(k)$ , парциальные автокорреляционные функции скоростей  $Z_{\alpha}(t)$ , нормализованные спектры  $f_n^{\alpha}(\omega)$ , среднеквадратичное смещение  $\langle r^2(t) \rangle_{\alpha}$  и коэффициенты диффузии  $D_{\alpha}$   $\alpha$ -атомов [5].

Для контроля сходимости результатов периодически через  $k_t$  временных шагов вычислялись температура, кинетическая и потенциальная энергия, давление системы, а также статистические ошибки расчета.

Атомная динамика системы исследовалась путем расчета и анализа временных функций ван Хова  $G(\vec{r}, t)$ ,  $G_s(\vec{r}, t)$ ,  $G_d(\vec{r}, t)$  и их Фурье-образов в виде промежуточных корреляционных функций когерентного  $F(\vec{k}, t)$  и некогерентного  $F_s(\vec{k}, t)$  рассеяния и динамических структурных факторов когерентного  $S(\vec{k}, \omega)$  и некогерентного  $S_s(\vec{k}, \omega)$  рассеяния [6]:

$$F(\vec{k}, t) = \langle \int [G(\vec{r}, t) - \rho] \exp(i\vec{k}\vec{r}) d\vec{r} \rangle, \quad (1)$$

$$S(\vec{k}, \omega) = \langle \frac{1}{2\pi} \int \exp(i\omega t) F(\vec{k}, t) dt \rangle, \quad (2)$$

где  $\vec{k}$  - волновой вектор, а  $\omega$  - частота. Статистическое усреднение  $\langle \dots \rangle$  временных функций проводилось по ансамблю частиц и начальному моменту времени.

МД-исследование жидкого калия и системы калий-кислород проводилось на моделях простой жидкости со сферически симметричным парным потенциалом. Для моделирования жидкого калия при  $T = 340, 440$  и  $550$  К использовались два типа потенциала взаимодействия, часто применяемых при теоретическом исследовании металлических расплавов, - это модифицированный потенциал Леннарда-Джонса [10] и межионный псевдопотенциал [11, 12] пустого ионного остова Ашкрофта [13] с диэлектрической функцией Гелбарда и Воско [14], который Миранда (КЗ) применил для МД-моделирования жидкого калия при  $T = 340$  К [15].

Исследование характеристик жидкого калия:  $g(r)$ ,  $S(k)$ ,  $Z(t)$ ,  $f_n(\omega)$ ,  $\langle r^2(t) \rangle$  и коэффициентов самодиффузии  $D$ , для числа частиц в МД-ячейке  $N = 250, 1024, 2000$  и  $3456$  и  $T = 340, 440$  и  $550$  К при варьировании радиуса пустого ионного остова Ашкрофта  $R_c$  позволило оптимизировать параметры потенциала для наилучшего согласования расчетных и экспериментальных данных [5, 8]. Это было достигнуто при использовании модифицированного потенциала Леннарда-Джонса с

$r_0 = 4.836 \text{ \AA}$  и межионного потенциала при  $R_c = 1.185 \text{ \AA}$  для радиальной функции  $g(r)$  и структурного фактора  $S(k)$  и спектра автокорреляционной функции скоростей (см. разд. 3).

Что касается коэффициента самодиффузии  $D$  атомов калия, то межионный потенциал с  $R_c = 1.185 \text{ \AA}$  наилучшим образом согласовывает результаты МД-расчета с экспериментальными данными [16] при всех температурах. Модифицированный

потенциал Леннарда-Джонса с  $r_0 = 4.836 \text{ \AA}$  дает удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных значений  $D$  только при  $T = 340$  К.

Следует отметить, что оптимизация параметров потенциала по положению и высоте пиков функций  $g(r)$  и  $S(k)$  не достаточна для получения нужных значений коэффициента самодиффузии. Требуется более тщательная подгонка искомых параметров путем согласования динамических характеристик, подверженных сильному влиянию потенциала. Особенно это относится к модифицированному потенциалу Леннарда-Джонса, который нуждался в подгонке практически для каждой вычисляемой характеристики. Поэтому при вычислении автокорреляционных функций жидкого калия [6] в дальнейшем использовали только межионный потенциал.

Функцию ван Хова  $G_s(r, t)$ , промежуточную корреляционную функцию  $F_s(k, t)$  и динамический структурный фактор  $S_s(k, \omega)$  некогерентного рассеяния иссле-

довали на изотропной модели  $N=2000$  с  $L=53.904 \text{ \AA}$  при  $T=340$  К и  $L=55.081 \text{ \AA}$  при  $T = 550$  К. При этом функцию  $F_s(k, t)$  определяли непосредственно в МД-расчетах и только для фиксированных значений модуля волнового вектора (из-за периодических граничных условий):  $k = (2\pi/L)\sqrt{l_1^2 + l_2^2 + l_3^2}$ , где  $l_1, l_2, l_3$  - целые числа.

При  $k > 1 \text{ \AA}^{-1}$   $F_s(k, t)$  быстро затухает как функция времени. В таком случае структурный фактор  $S_s(k, \omega)$  можно вычислять с помощью преобразования Фурье

в виде определенного интеграла [17], неприменимого для  $k < 1 \text{ \AA}^{-1}$  (где  $F_s(k, t)$  как функция времени изменяется медленно), поскольку косинус-интеграл Фурье на конечном отрезке времени дает модуляции и в целом неадекватный спектр  $S_s(k, \omega)$ .

Чтобы исключить эти эффекты, в программе MOLDY предусмотрена доработка "хвоста" функции  $F_s(k, t)$  экспоненциальным приближением  $F_s^{\text{exp}}(k, t) = \exp(-k^2 Dt)$  при  $t \rightarrow \infty$  и Фурье-преобразование модифицированной  $F_s^{\text{res}}(k, t)$  в спектры  $S_s^{\text{res}}(k, \omega)$  для малых значений модуля волнового вектора (см. рис.1).

При МД-исследовании примеси кислорода в жидком калии использовалась модель тройной системы  $(1-3x)\text{K} + 2x\text{K}^{q+} + x\text{O}^{2q-}$ , где  $x = 0.085$  - атомная доля кислорода в смеси,  $q$  - величина заряда катиона калия [18]. Моделирование проводилось при  $550$  К для  $q = 1$  на модели из  $N = N_{\text{K}} + N_{\text{K}^{q+}} + N_{\text{O}^{2q-}}$  частиц в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Учитывая зарядовую нейтральность системы, получаем  $N_{\text{K}^{q+}} = 2N_{\text{O}^{2q-}}$ . При этом объем кубической МД-ячейки  $V = L^3$  выби-

рался из условия плотности жидкого калия  $\rho_K = 777 \text{ кг/м}^3$  и 8.5% кислорода в виде микровключений с плотностью  $\rho_{K_2O} = 2320 \text{ кг/м}^3$ .

Для парного взаимодействия частиц:  $(K^+, K^+)$ ,  $(K^+, O^{2-})$ ,  $(O^{2-}, O^{2-})$  и  $(K, O^{2-})$  использовали потенциал Борна-Мейера без дисперсионных членов [19]

$$U_{\bar{a}\bar{a}}(r) = \frac{Z_{\bar{a}} Z_{\bar{a}} e^2}{r} + C_{\bar{a}\bar{a}} B \left( 1 + \frac{Z_{\bar{a}}}{n_{\bar{a}}} + \frac{Z_{\bar{a}}}{n_{\bar{a}}} \right) \exp[A(\sigma_{\bar{a}} + \sigma_{\bar{a}} - r)], \quad (3)$$

где  $e$  - заряд электрона,  $C_{K+K+} = 1.25$ ,  $C_{K+O^{2-}} = 1.0$ ,  $C_{O^{2-}O^{2-}} = 0.75$  - коэффициенты Паулинга,  $B = 0.211 \text{ эВ}$  и  $A = 3.45 \text{ \AA}^{-1}$  - параметры отталкивания ионных остовов и экранирования соответственно,  $\sigma_{K+} = 1.39 \text{ \AA}$ ,  $\sigma_{O^{2-}} = 1.33 \text{ \AA}$  - радиусы ионов,  $Z_{K+} = +1$ ,  $Z_{O^{2-}} = -2$  - заряд катиона и аниона соответственно,  $n_{K+} = n_{O^{2-}} = 8$  - число электронов на внешней оболочке ионных остовов. Нейтральный атом калия взаимодействует с анионом кислорода по тому же потенциалу при  $Z_K = 0$ .

Для описания взаимодействия атомов калия  $(K, K)$  и катиона  $(K, K^+)$  использовали описанный выше межйонный потенциал с  $R_c = 1.185$  [5].

При МД-расчете действие потенциала анионов кислорода ограничивалось половиной длины ребра кубической ячейки. Учитывая малое число атомов кислорода в смеси и катионное экранирование анионов, можно надеяться, что это ограничение не изменило существенно модель рассматриваемой системы.

Моделирование проводилось при жесткой "привязке" заряда к ионам калия [18] и с обменом заряда между соседними  $K$  и  $K^+$  [20, 21] по следующей схеме.

Через каждые 50 временных шагов МД-расчета производили одновременный обмен зарядом ( $K \leftrightarrow K^+$ ) между соседними атомами ( $K$ ) и катионами ( $K^+$ ) калия. После этого систему приводили в равновесное состояние обычным образом и затем рассчитывали интересующие нас характеристики. Процедура зарядового обмена позволила избежать недостатков МД-моделирования диффузионно-лимитированной агрегации заряженных частиц.

Для каждой компоненты смеси рассчитывались функции  $g_{\alpha\beta}(r)$ ,  $S_{\alpha\beta}(k)$ ,  $Z_{\alpha}(t)$ ,  $f_n^{\alpha}(\omega)$  и коэффициенты диффузии  $D_{\alpha}$   $\alpha$ -частиц в различные моменты времени  $t_i$ . Соответствующие этим моментам времени атомные конфигурации анализировались с помощью методов статистической геометрии.

Было установлено, что все функции  $g_{\alpha\beta}(r)$ ,  $\Psi_{\alpha\beta}(t)$ ,  $f_n^{\alpha}(\omega)$  для нейтрального калия практически не меняются при  $t > 3.0 \cdot 10^{-11} \text{ с}$  в отличие от парциальных функций ионов, для которых характерно медленное изменение параметров на больших временах, что, по-видимому, связано со структурными (диффузионными) изменениями системы калий-кислород.

## ЭКСПЕРИМЕНТЫ ПО НЕУПРУГОМУ РАССЕЯНИЮ НЕЙТРОНОВ

Эксперименты по неупругому рассеянию нейтронов на жидком калии и сплаве калий-кислород подробно описаны в работах [22-24]. Они проводились на спектрометре ДИН-2ПИ, использующем один из нейтронных пучков быстрого импульсного реактора ИБР-2 лаборатории нейтронной физики им. И.М. Франка (ОИЯИ, Дубна). Образец исследуемого расплава был выполнен в виде циркуляционной петли, что позволяло изменять и контролировать концентрацию кислорода без остановки эксперимента.

Измерения на чистом калии проведены при трех температурах: 340, 440 и 550 К. Расплав калий-кислород исследовался при 550 К и трех концентрациях кислоро-

да: 1.8, 5.1 и 8.5% ат. Согласно данным по растворимости этой примеси в жидком калии [4], при выбранной температуре никаких оксидных фаз в расплаве не существовало.

Из полученного в эксперименте полного дважды дифференциального сечения рассеяния (ДДСР) выделялись две его составляющие, соответствующие квазиупругому и неупругому рассеянию. Первая из них содержит информацию о характере диффузии в исследуемой жидкости (эти данные для чистого калия представлены в [25], а для расплава калий-кислород в [23, 26]), тогда как вторая используется для анализа колебательного движения частиц в силовом поле соседей. Такая информация выражается обычно в форме частотного спектра колебаний атомов расплава и является ключевой характеристикой вещества, определяющей как его микроскопические, так и термодинамические свойства [27]. Детали, связанные с процедурой обработки нейтронного эксперимента, и основные соотношения, используемые при этом, можно найти в [28].

# СРАВНЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ С МД-РАСЧЕТАМИ

## Чистый калий

На рис. 1 сравниваются расчетные и экспериментальные пики квазиупругого рассеяния для двух температур, из чего следует вывод о хорошем согласии полученных результатов. О том же свидетельствует и рис. 2, где показаны частотные спектры колебаний атомов калия для двух температур. Небольшое отличие экспериментальных спектров от расчетных при энергиях возбуждения  $\hbar\omega \sim 5\text{-}6$  МэВ

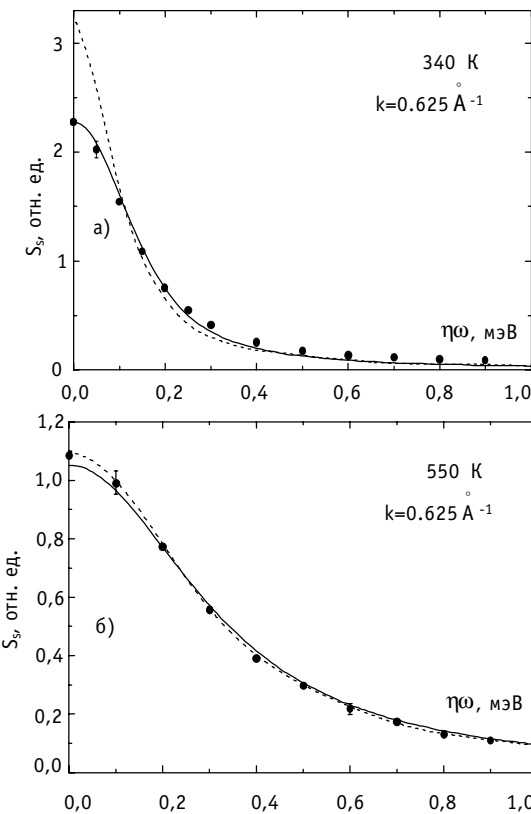


Рис. 1. Расчетные  $S_y(k, \omega)$  (---),  $S_y^{\text{res}}(k, \omega)$  (—) и экспериментальные  $S_y^{\text{exp}}(k, \omega)$  (••), пики квазиупругого рассеяния при  $k = 0.625 \text{ \AA}^{-1}$  и двух температурах: 340 К (а) и 550 К (б)

можно отнести на счет неполного учета когерентных эффектов при обработке данных эксперимента.

Рассчитанные и измеренные значения коэффициентов самодиффузии калия:  $D_s = 3.85 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$  и  $D_p = 3.70 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$  при  $T = 340 \text{ К}$ ,  $D_s = 12.50 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$  и  $D_p = 11.96 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$  при  $T = 550 \text{ К}$ , позволяют заявить об адекватности выбранного для калия парного потенциала взаимодействия и корректности использованных расчетных процедур.

## Расплав калий-кислород

Анализ неупругих составляющих экспериментальных ДДСР, полученных на расплаве К-О, подробно изложен в [24]. Результатом такого анализа был частичный частотный спектр элементарных колебаний кислорода в расплаве, извлечение которого осуществлялось двумя способами:

1) ДДСР чистого калия после нормировки вычиталось из ДДСР расплава;

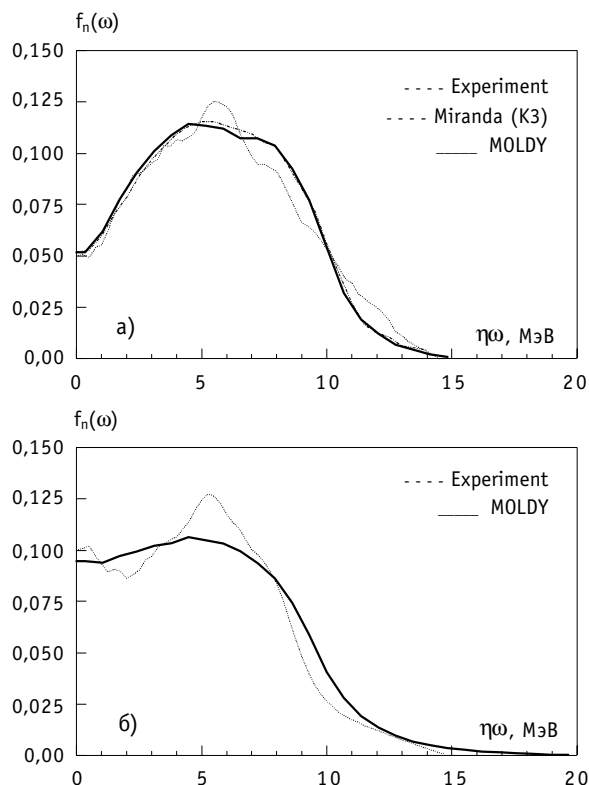


Рис. 2. Частотные спектры жидкого калия при 340 К (а) и 550 К (б), полученные в эксперименте (---) и МД-расчетах (—)

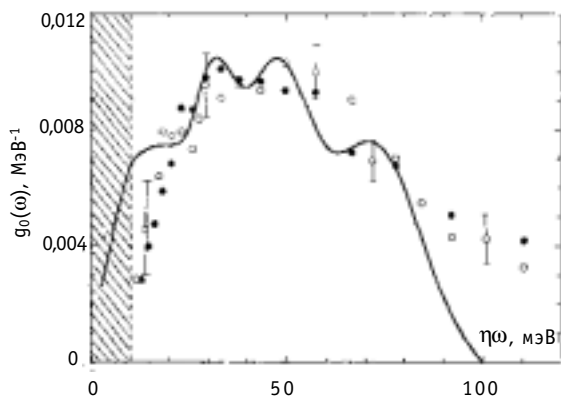


Рис. 3. Частотный спектр кислорода в расплаве К-О при 550 К, полученный МД-методом (—) и при анализе экспериментальных данных с использованием ДДСР чистого калия (•) и разностных по кислороду ДДСР системы К-О (○). Извлечение частотного спектра на отрезке  $0 \leq \hbar\omega \leq 10$  МэВ (заштрихованная область) не проводилось

нием частот колебаний атомов жидкого калия [32] на МД-расчет при зарядовом обмене  $\text{K} \leftrightarrow \text{K}^+$  (см. выше).

Анализ структуры модельного расплава методами статистической геометрии показал, что анионы кислорода имеют тенденцию группироваться в разветвленные кластеры  $(\text{K}_2\text{O})_n$ , один из которых показан на рис. 4.

2) ДДСР расплава, соответствующие разным концентрациям кислорода, вычитались друг из друга и анализировались.

Предполагалось [24], что полученные разным образом спектры относятся только к кислороду. Именно поэтому на практике они оказались близки друг другу, что подтверждается рис. 3.

Видно, что экспериментальные данные удовлетворительно согласуются с результатами МД-моделирования для средних энергий возбуждения  $20 < \hbar\omega < 80$  МэВ. На краях же имеет место явное расхождение данных. МД-расчет демонстрирует отсутствие каких-либо мод при  $\hbar\omega \geq 100$  МэВ, тогда как в эксперименте эта область спектра имеет монотонно спадающую интенсивность. Правда, статистическая точность экспериментальных данных здесь весьма низкая. Более того, измеренные фоновые спектры некоторых оксидов ( $\text{MgO}$  [29],  $\text{CuO}$  [30]) свидетельствуют о том, что верхняя граница этих спектров не превосходит уровня энергии 60–80 МэВ. Сравнивая термодинамические свойства этих веществ с такими же данными для оксида калия [31], следует заключить, что для последнего эта граница не может быть выше. Возможно, “хвост” экспериментальной кривой носит методический характер и связан с некорректным учетом эффектов многократного рассеяния.

Расхождение результатов численного моделирования и данных эксперимента при  $\hbar\omega \leq 15$  МэВ, по-видимому, обусловлено влиянием частот колебаний атомов жидкого калия [32] на МД-расчет при зарядовом обмене  $\text{K} \leftrightarrow \text{K}^+$  (см. выше).

Существование кислорода в форме двухзарядного аниона в расплавах щелочных металлов обнаружено давно [33-36]. В последней работе приводится единственный, известный нам, частотный спектр колебаний кислорода в расплаве Cs-O, полученный в эксперименте по рамановскому рассеянию света. Что же касается строения и свойств комплексов  $(K_2O)_n$ , возникающих в жидком калии, то такие данные в научной литературе нам неизвестны.

Структурная модель кислорода (рис. 4) в жидком калии подтверждается видом функций радиального распределения  $g_{K+K+}$  и  $g_{O2-O2-}$ , представленных на рис. 5.

Из анализа этих кривых следует, что число ближайших соседей у катиона калия в форме  $K^+ \sim 2$  и у кислородного аниона в форме  $O^{2-}$  тоже  $\sim 2$ . При этом расщепление главного пика функции  $g_{K+K+}$  можно интерпретировать как результат поворота части молекулярных комплексов  $K_2O$  на  $90^\circ$  вокруг ветви кластера, так что теперь расстояние между ближайшими катионами калия имеет два значения, рав-

ные 2.9 и 4.5 Å согласно рис. 5. Из “заселенности” субпиков следует, что повернутый молекулярный комплекс появляется реже.

Расщепление главного пика функции  $g_{O2-O2-}$  является, по-видимому, следствием упомянутого эффекта: поворот комплексов относительно ветви кластера приводит к уменьшению расстояния между анионами кислорода. Из рис. 5 видно, что

эти расстояния равны, соответственно, 3.7 и 4.4 Å; т.к. первый субпик заселен меньше, то он относится к молекулярным комплексам, повернутым относительно других на  $90^\circ$ . Заметим при этом, что в МД-расчетах [5] получен аномально узкий пик функции  $g_{K+O2-}$ , который указывает на фиксированное расстояние между противоположными зарядами в молекулярном комплексе  $K_2O$  и, следовательно, на сильную связь между ними.

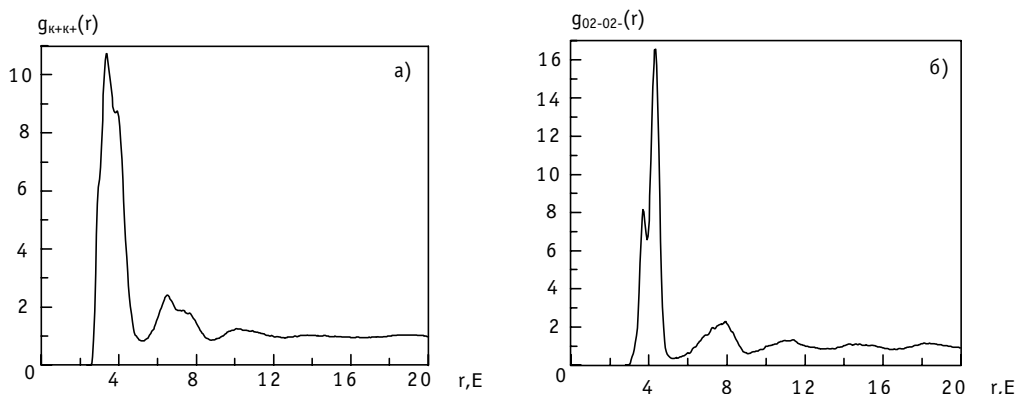


Рис. 5. Функции радиального распределения  $g_{K+K+}$  (а) и  $g_{O2-O2-}$  (б), полученные при МД-моделировании системы калий-кислород

Рис. 4. Типичный кластер  $(K_2O)_n$  в МД-модели расплаве K-O при 550 K, состоящий из разветвленных цепей анионов кислорода (большие кружки) и катионов калия (малые кружки)

Вышеприведенное сравнение расчетных и экспериментальных частотных спектров кислорода, представленное на рис. 3, говорит о некотором сходстве между ними. Что касается интерпретации самого вида частотного спектра, то пока это может быть сделано сугубо качественно. Колебательные моды анионов кислорода условно можно разделить на “оптическую” и “акустическую” области. Первая из них (высокочастотная) включает колебания аниона внутри молекулярного комплекса  $K_2O$  в двух направлениях: перпендикулярно ветви кластера (наиболее высокочастотные моды) и вдоль ее оси. Низкочастотная (“акустическая”) область частотного спектра кислорода, по-видимому, связана с колебаниями молекулярного комплекса  $K_2O$ . Аналитические оценки колебательного спектра комплекса планируются нами в ближайшее время.

## ВЫВОДЫ

Проведен большой цикл МД-расчетов по моделированию структурных и динамических характеристик жидкого калия и расплава калий-кислород.

Представлен редкий случай прямого сравнения данных МД-моделирования и эксперимента по неупругому рассеянию нейтронов для указанных систем.

Хорошее согласие данных МД-моделирования и нейтронного эксперимента на чистом калии свидетельствует об адекватности использованных физических моделей и корректности расчетных процедур.

Сравнение расчетных и экспериментальных частотных спектров колебаний кислорода в расплаве демонстрирует их согласие в области средних энергий ( $20 < \hbar\omega < 80$  МэВ). Выявление причин расхождения экспериментальных и расчетных данных на краях спектра требует более глубокого изучения процессов, протекающих в расплаве, а также более тщательной постановки эксперимента и обработки его данных.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 96-02-16315) и ГНТП “Актуальные направления в физике конденсированных сред”, направление “Нейтронные исследования”.

Авторы благодарны профессору М.Н. Ивановскому и В.А. Морозову за полезное обсуждение работы и признательны Т.А. Кувшинчиковой за помощь при оформлении рукописи.

## Список литературы

1. Субботин В.И., Арнольдov М.Н., Ивановский М.Н. Физико-химические основы применения жидкометаллических теплоносителей. - М.: Атомиздат, 1970.
2. Коррозия конструкционных материалов в жидких щелочных металлах / Под ред. Б.А. Невзорова. - М.: Атомиздат, 1977.
3. Ивановский М.Н., Морозов В.А., Шимкевич А.Л., Шматко Б.А. О термодинамической устойчивости сложных окислов в щелочных металлах // Теплофизика высоких температур. - 1982. - Т. 20. - № 6. - С. 1098.
4. Ивановский М.Н., Морозов В.А., Шимкевич А.Л., Шматко Б.А. О растворимости кислорода в щелочных металлах // Теплофизика высоких температур. - 1983. - Т. 21. - № 5. - С. 909.
5. Шимкевич И.Ю., Новиков А.Г., Савостин В.В., Шимкевич А.Л. Структурные и динамические свойства МД-модели жидкого калия: Препринт ГНЦ РФ - ФЭИ, № 2437. - Обнинск, 1995.
6. Шимкевич И.Ю., Новиков А.Г., Савостин В.В., Шимкевич А.Л. Молекулярно-динамическое исследование автокорреляционных функций жидкого калия: Препринт ГНЦ РФ - ФЭИ, № 2645. - Обнинск, 1997.
7. Полухин В.А., Ухов В.Ф., Дзугутов М.М. Компьютерное моделирование динамики и структуры жидких металлов. - М.: Наука, 1981.
8. Шимкевич И.Ю., Шимкевич А.Л. МДММК (Молекулярная динамика и метод Монте-Карло)-программа для построения кристаллических и неупорядоченных систем: Препринт ГНЦ РФ - ФЭИ, № 2524. - Обнинск, 1996.



9. Кузин В.В., Морозов В.А., Шимкевич А.Л., Шимкевич И.Ю. О структуре молекулярно-динамической модели жидкого калия: Препринт ГНЦ РФ - ФЭИ, № 2415. - Обнинск, 1994.
10. Shu Zhen, Davies G.J. Calculation of the Lennard-Jones  $n$ - $m$  Potential Energy Parameters for Metals // Phys. Stat. Sol. (A). - 1983. - V. 78. - P. 595.
11. Shyu Wei-Mei, Singwi K.S., Tosi M.P. Many-Electron Correlation Effects on the Metallic Interionic Potential // Phys. Rev. B. - 1971. - V. 3. - P. 281.
12. Berezhkovsky L.M., Drozdov A.N., Zitserman V.Yu., Lagar'kov A.N., Triger S.A. Molecular Dynamics Simulation of the Transport Properties of Liquid Sodium and Potassium // J. Phys. F. - 1984. - V. 14. - P. 2315.
13. Ashcroft N.W. Electron-Ion Pseudopotentials in Metals // Phys. Lett. - 1966. - V. 23. - P. 48.
14. Gelbart D.J.W., Vosko S.H. The Screening Function of an Interacting Electron Gas // Can. J. Phys. - 1966. - V. 44. - P. 2137.
15. Miranda Gonzalez J.M. A Molecular Dynamics Study of Liquid Potassium at 340K // J. Phys. F. - 1986. - V. 16. - P. 1.
16. Handbook of Thermodynamic and Transport Properties of Alkali Metals / Ed. R. Ohse. - Oxford: Blackwell Sci. Publ., 1980.
17. Lado F. Numerical Fourier Transforms in One, Two, and Three Dimensions for Liquid State Calculations // Journal of Computational Physics. - 1971. - V. 8. - P. 417.
18. Шимкевич И.Ю., Кузин В.В., Шимкевич А.Л. Исследование тройной системы  $K + K^q + O^{2q}$  методом молекулярной динамики и статистической геометрии: Препринт ГНЦ РФ - ФЭИ, № 2724. - Обнинск, 1998.
19. Tissen J.T.W.M., Janssen G.J.M. Molecular-Dynamics Simulation of Molten Alkali Carbonates. // Molecular Physics. - 1990. - V. 71. - P. 413.
20. Shimkevich A.L., Shimkevich I.Yu., Kuzin V.V. Molecular Dynamics Study of Ternary System  $K + K^q + O^{2q}$  // Condensed Matter Physics. - 1999. - V. 2. - P. 329.
21. Shimkevich I.Yu., Kuzin V.V., Shimkevich A.L. Dynamic Structure of Oxygen in Liquid Potassium Studied by MD Method and Statistical Geometry // Journal of Non-Crystalline Solids. - 1999. - V. 250-252. - P. 129.
22. Заезжев М.В., Ивановский М.Н., Новиков А.Г., Савостин В.В., Шимкевич А.Л. Атомная динамика жидкого калия в температурном режиме 340-550 К // Теплофизика высоких температур. - 1994. - Т. 32. - № 5. - С. 749.
23. Заезжев М.В. и др. Диффузия кислорода в расплаве калий-кислород: Препринт ГНЦ РФ - ФЭИ, № 2336. - Обнинск, 1993.
24. Заезжев М.В., Новиков А.Г., Савостин В.В., Шимкевич А.Л. Микродинамика расплава калий-кислород: Препринт ГНЦ РФ - ФЭИ, № 2713. - Обнинск, 1998.
25. Novikov A.G. et al. // J. Phys.: Cond. Matter. - 1996. - V. 8. - № 20. - P. 3525.
26. Zaezjev M.V., Ivanovsky M.N., Karymov D.I., Novikov A.G., Savostin V.V. // Physica B. - 1997. - V. 234-236. - P. 919.
27. Гуревич И.И., Тарасов Л.В. Физика нейтронов низких энергий. - М.: Наука, 1965.
28. Лисичкин Ю.В. и др. Вопросы атомной науки и техники // Ядерные константы. - 1979. - Вып. 2. - С. 12.
29. Sangster M., Peckham G., Saunderson D. // J. Phys. C. - 1970. - V. 3. - № 5. - P. 1026.
30. Паршин П.П., Землянов М.Г., Солдатов П.И. // ЖЭТФ. - 1992. - Т. 101. - Вып. 2. - С. 750.
31. Физико-химические свойства окислов: Справочник/ Под ред. Г.В. Самсонова. - М.: Металлургия, 1978.
32. Заезжев М.В., Ивановский М.Н., Новиков А.Г., Савостин В.В., Шимкевич А.Л. // Журн. физ. химии. - 1994. - Т. 68. - № 2. - С. 371.
33. Kendall P.W. // Nucl. Materials. - 1970. - V. 35. - P. 41.
34. Ivanovsky M.N., Morosov B.A., Shimkevich A.L., Smatko B.A. // Liquid Metal Engineering, BNES. - 1984. - V. 3. - P. 15.
35. Tsuchiya Y., Seymour E., Styles G. // J. Phys.: Cond. Matter. - 1994. - V. 6. - P. 3889.
36. Simon A. // J. Solid State Chem. - 1979. - V. 27. - № 1. - P. 87.

Поступила в редакцию 22.11.99.

## ABSTRACTS OF THE PAPERS

### УДК 621.311.25:621.039(571.16)

*Nuclear Power Engineering in the Power Supply System of Tomsk* \V.N. Mescheryakov, V.I. Boiko, F.P. Koshelev; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) – Obninsk, 2000. – 6 pages. – References, 7 titles.

A comparison of ecological and economical aspects of coal and nuclear energy usage in the power supply system of Tomsk is made.

Ecological and economical consequences of hypothetical situation when NPP-1 and NPP-2 of Siberian chemical plant would be replaced by heat-power plants working on coal are surveyed.

### УДК 621.039.586

*The Analysis of Conditions of Transient Process for the De-energization of the Power Unit* \A.Yu. Prohodtsev, N.L. Sal'nikov; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) – Obninsk, 2000. – 7 pages, 1 illustration, 2 tables. – References, 7 titles.

Forming of initial and boundary conditions for usage of the RELAP5code for an analysis of the transient process under de-energization of the VVER-1000 unit is considered. It is shown that the worst conditions as to the safety in design accidents under de-energization of the unit are formed in the case fast reduction device failure.

### УДК 539.17.013

*Exact and Numerical Solutions of Nonlinear Thermal Conductivity and Kinetic Equations* \V.A. Galkin, M.A. Zaboudko; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) – Obninsk, 2000. – 10 pages, 8 illustrations. – References, 11 titles.

The methods of solution of nonlinear thermal conductivity and kinetic equations are considered in this paper. Some exact solutions for Stefan problem are received. Numerical regularization is made on the base of the Galerkin method. Convergence problems are investigated.

### УДК 621.039.524.7:621.039.574.5

*Heavy-Water Installations in Russia* \O.V. Shvedov, A.S. Gerasimov, G.V. Kiselev, V.V. Seliverstov, V.V. Petrunin, V.V. Shidlovsky; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) – Obninsk, 2000. – 11 pages. – References, 4 titles.

The review of work of the State Scientific Center of Russian Federation-Institute of Theoretical and Experimental Physics - scientific leader in the heavy-water reactors design is represented in this paper. Results of exploitation of the industrial heavy-water reactor L-2, working in isotopic mode are described. It is informed about the conceptual propositions on the development of new isotopic heavy-water reactor for providing of requirement in radionuclides. The results of examination of subcritical systems for extermination of long-lived radioactive wastage and production of energy are stated.

### УДК 519.6, 539.1

*Atomic Dynamics of Liquid Potassium and Potassium-oxygen Melt from Data of the Molecular-dynamics Simulation and Inelastic Neutron Scattering Experiments* \I.Yu. Shimkevich, M.V. Zaezjev, V.V. Kuzin, A.G. Novikov, V.V. Savostin, A.L. Shimkevich; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) – Obninsk, 2000. – 9 pages, 5 illustrations. – References, 36 titles.

An algorithm and procedure for the molecular-dynamics (MD) simulation of liquid potassium and the potassium-oxygen melts are presented. The results of MD-calculation are compared with experimental data on the inelastic neutron scattering. Such approach is the most effective method for studying structural and dynamical properties of condensed matter on the microscopic level.