

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ ПРИ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ

Ломоносов И.В.

*Институт проблем химической физики Российской Академии Наук,
142432, Черноголовка, пр. Акад. Семенова 1,
e-mail: ivl143@yandex.ru*

Согласно современным представлениям¹, более 90% наблюдаемого вещества Вселенной находится в условиях экстремально высоких давлений и температур. Вопросы поведения структуры вещества при экстремальных условиях, ожидаемые новые химические эффекты, методы получения экстремальных состояний в лабораторных условиях и исследования физико-химических свойств веществ рассмотрены в обзоре².

В докладе обсуждается состояние проблемы экспериментального и теоретического изучения фундаментальных физико-химических свойств веществ при экстремальных условиях, описания физико-химических превращений, фазовых границ плавления и испарения, эффектов перестройки электронной структуры, ионизации, металлизации и диэлектризации.

Приводятся результаты расчетов свойств металлов и конструкционных материалов с помощью широкодиапазонных моделей физико-химических свойств в сопоставлении с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными при экстремальных условиях. Обсуждаются вопросы численного моделирования физико-химических процессов различной природы в условиях мощного энерговыделения, внедрения моделей свойств в численные коды, качества описания и достоверности расчетных результатов. Приводятся примеры 3-х и 2-х мерного численного моделирования высокоэнергетических процессов, указывается важность надежного описания физико-химических свойств вещества в широкой области фазовой диаграммы.

Обсуждаются вопросы разработки, функционирования и представления экспериментальных данных и аппроксимаций термодинамических свойств веществ в виде онлайн-банка данных.

Литература

1. Fortov, V.E. Thermodynamics and equations of state for matter: from ideal gas to quark-gluon plasma. London: World Scientific, 2016. - 555p.
2. Фортвов В.Е., Минцев В.Б. Успехи химии, 2013, 82, 597.