



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 83 за 2021 г.



ISSN 2071-2898 (Print)  
ISSN 2071-2901 (Online)

**В.И. Мажукин, О.Н. Королева,  
М.М. Демин, А.А. Алексашкина**

Атомистическое  
моделирование параметров  
критической области золота  
с использованием кривой  
сосуществования жидкость-  
пар

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Атомистическое моделирование параметров критической области золота с использованием кривой сосуществования жидкость-пар / В.И. Мажукин [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2021. № 83. 16 с.  
<https://doi.org/10.20948/prepr-2021-83>  
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2021-83>

**Ордена Ленина  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
имени М.В.Келдыша  
Российской академии наук**

**В.И. Мажукин, О.Н. Королева, М.М. Демин,  
А.А. Алексашкина**

**Атомистическое моделирование  
параметров критической области золота  
с использованием кривой  
сосуществования жидкость-пар**

**Москва — 2021**

*Мажукин В.И., Королева О.Н., Демин М.М., Алексашкина А.А.*

**Атомистическое моделирование параметров критической области золота с использованием кривой сосуществования жидкость-пар**

Методом молекулярно-динамического (МД) моделирования получена кривая сосуществования жидкость–пар для золота и определены критические параметры: температура, плотность и давление. Использован потенциал взаимодействия частиц семейства “погруженного атома” ЕАМ. Значение критической температуры  $T_{cr}$  определялось по результатам МД моделирования с использованием метода среднего размера кластеров в критической области. Для уточнения значения критической плотности использовалось эмпирическое правило прямолинейного диаметра. Проведено сравнение результатов моделирования данной работы с результатами оценки критических параметров золота другими авторами, использующими различные подходы.

**Ключевые слова:** молекулярно-динамическое моделирование, кривая сосуществования жидкость–пар, критические параметры, золото.

*Mazhukin V.I., Koroleva O.N., Demin M.M., Aleksashkina A.A.*

**Atomistic modeling of the parameters of the critical region of gold using the liquid-vapor coexistence curve**

The liquid-vapor coexistence curve for gold was obtained by molecular dynamics (MD) modeling and the critical parameters were determined: temperature, density and pressure. The interaction potential of particles of the “embedded atom” family EAM is used. The critical temperature  $T_{cr}$  was determined from the results of MD simulation using the method of the average cluster size in the critical region. To clarify the value of the critical density, the empirical rule of the rectilinear diameter was used. The comparison of the simulation results of this work with the results of the assessment of the critical parameters of gold by other authors using different approaches.

**Key words:** molecular dynamics modeling, liquid-vapor coexistence curve, critical parameters, gold.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект 18-11-00318.

## Введение

Определение параметров критических точек фазового перехода жидкость-пар в металлах важно как с теоретической, так и с практической точки зрения. Особенно важны критические параметры переходных металлов, которые наиболее широко используются для разработки перспективных конструкционных материалов и сплавов [1].

Особый интерес к линии фазового равновесия жидкой и газовой фаз связан с тем, что граничная кривая (бинодаль) отделяет однородные состояния вещества от двухфазных метастабильных состояний. Метастабильные состояния перегретой жидкости и насыщенного пара изучены сравнительно мало [2]. Между тем для решения многих практических задач требуется знание свойств перегретой жидкости и насыщенного пара [3]. В частности, свойства перегретой жидкости существенно влияют на характер кипения жидкости, а свойства перенасыщенного пара определяют процесс конденсации [4]. В критической точке, в отличие от других точек граничной кривой, свойства обеих фаз (жидкость, пар) идентичны, то есть критическое состояние является одним и тем же предельным физическим состоянием для обеих фаз.

При приближении к критической точке свойства вещества меняются, так как появляются новые явления и механизмы взаимодействия частиц вещества, такие как флуктуации параметров вещества (в первую очередь плотности), значение которых очень быстро растет при приближении к критической точке и стремится к бесконечности в самой критической точке. В такой ситуации рассмотрение критического состояния на основе теоретического подхода с использованием термодинамических функций применимо только в области, где флуктуации относительно малы [5].

Из-за сложности проведения экспериментов при высоких температурах параметры критической точки были получены только для небольшого количества веществ, в том числе щелочных металлов и ртути, имеющих относительно низкие температурные характеристики [6-9]. Для большинства металлов в статических экспериментах критическая область недостижима из-за высокой критической температуры (10000 К). Большинство экспериментов носит импульсный характер. Приведены данные по быстрому импульсному нагреву проволок из переходных металлов в воде и инертных газах под давлением, полученные разными авторами в [10, 11]. В этих исследованиях измерения энтальпии, плотности, температуры и электросопротивления проводились в интервале температур от температуры плавления  $T_m$  до температур 5000–7000 К. В работах [12,13,14], выполненных по той же методике, авторам удалось экспериментально оценить параметры критической точки золота.

Для других материалов имеются только теоретические оценки в рамках различных моделей, среди которых выделяются феноменологические методы [15-23] и методы атомистического моделирования [29-37].

Широко используются эмпирические соотношения, связывающие параметры критической точки с различными характеристиками вещества в жидком и газовом состоянии. К ним относится основанный на законах подобия принцип соответственных состояний [15], характеристические линии (например, линия Зено – линия единичной сжимаемости), получившие широкую популярность [18,19,24], метод прямолинейного диаметра [5], оценки критической температуры путем экстраполяции экспериментально найденной зависимости поверхностного натяжения  $\sigma=f(T)$  [20,21], оценки критических параметров, основанные на связи паров металлов с потенциалом ионизации атомов [16], среди этих соотношений есть и правило Коппа-Ланга [17], связывающее критическую температуру с энергией испарения. В [22] предложен метод расчета параметров критических точек и бинодали перехода пар-жидкость (диэлектрик-металл) в парах металлов. Модель основана на предположении, что когезия, определяющая основные характеристики металлов в нормальных условиях, также отвечает за свойства металлов в окрестности критической точки. Также широко используются оценки, полученные из полуэмпирических уравнений состояния [24-27]. В [28] критические температуры  $T_c$  для 36 жидких металлов были оценены из экспериментальных скоростей звука с использованием метода изохорного коэффициента теплового давления.

Важным инструментом моделирования свойств веществ и физических процессов, недоступных для прямого измерения, является математическое моделирование на основе атомистических моделей. Атомистический подход представлен методами Монте-Карло [23,35,36,37] и молекулярной динамики [29-34]. В рамках метода Монте-Карло для определения критических параметров металлов и неметаллических веществ используется подход Ванга – Ландау (EWL) [35].

Математическое моделирование, основанное на методе молекулярной динамики, за последние два десятилетия стало мощным инструментом фундаментального исследования свойств [31,33,34-37] и процессов [29,30,32,36,37] в материалах.

Несмотря на сложность теоретических и экспериментальных подходов, интерес к исследованиям в этой области сохраняется.

Целью данной работы является получение кривой сосуществования жидкости и пара для золота и определение соответствующих критических параметров: температуры, плотности и давления с использованием молекулярно-динамического моделирования с потенциалом взаимодействия EAM [34]. Этот потенциал был ранее протестирован и использован для описания процессов в твердой и жидкой фазах золота в области плавления в [38]. Расчеты проводились с использованием пакета LAMMPS [39].

## 1. Математическая формулировка задачи

Метод молекулярной динамики основан на представлении рассматриваемого объекта в виде совокупности частиц, для которых записываются уравнения Ньютона. Для каждой частицы рассматривается масса  $m_i$ , скорость  $v_i$  и радиус-вектор  $r_i$ . Получается система из  $2N$  обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ):

$$\begin{cases} m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i + F_i^{ext} \\ \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i \end{cases}, \quad i=1..N \quad (1)$$

где  $\vec{F}_i = -\frac{\partial U(\vec{r}_1.. \vec{r}_N)}{\partial \vec{r}_i}$  – сила взаимодействия между частицами,  $\vec{F}_i^{ext}$  – сила взаимодействия с внешними полями,  $U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$  – потенциальная энергия системы  $N$  частиц.

### Начальные и граничные условия

В начальный момент времени рассматриваемый объект представляет собой кристалл при температуре  $T$ , частицы расположены в узлах кристаллической решетки. Скорости частиц в начальный момент задаются как случайные величины, соответствующие распределению Максвелла при удвоенной температуре  $2T$ . Перед началом моделирования производится релаксация такого объекта с включенным термостатом [40] и баростатом [41], и достаточно быстро часть кинетической энергии переходит в потенциальную и температура становится равной  $T$ , а давление устанавливается  $P=0$ .

В качестве граничных условий используются периодические условия. При периодических граничных условиях по  $Ox$  считают, что частица, вышедшая через правую границу, заменяется на частицу, имеющую такую же скорость, но вошедшую через левую границу.

В дальнейшем система ОДУ (1) решается с помощью конечно-разностной схемы Верле [42]. В этом методе координаты частиц вычисляются на целых временных слоях, а скорости на полуцелых.

### Потенциал взаимодействия частиц

Точность результатов молекулярно-динамического моделирования существенно зависит от используемого потенциала взаимодействия частиц. Для МД моделирования металлов широкое распространение получили потенциалы семейства “погруженного атома” (EAM). Для определения теплофизических свойств золота, а также ветвей кривой сосуществования жидкость-пар и критических параметров золота в данной работе использовался потенциал (EAM) из этого семейства, разработанный и протестированный на золоте в [34]. Потенциал EAM построен на основе как экспериментальных данных, так и

полученных *ab initio*. Результаты тестирования потенциала на золоте показали его надежность и хорошее совпадение с данными эксперимента. Полуэмпирический потенциал “погруженного атома” присутствует в пакете LAMMPS в виде таблиц [39].

## 2. Вычислительный алгоритм

Расчет критических параметров золота критической температуры  $T_{cr}$ , критической плотности  $\rho_{cr}$  и критического давления  $P_{cr}$ , проводился в рамках следующего вычислительного эксперимента.

В основе вычислительного алгоритма лежит непосредственное наблюдение в вычислительном эксперименте (ВЭ) жидкости и пара в двухфазной системе. Расчетная область выбиралась в виде куба с размерами  $25 \times 25 \times 25$  элементарных ячеек. В такой области содержится 63750 частиц. По всем трем осям задаются периодические граничные условия. Расчетная область заполняется частично модельной жидкостью при температуре заведомо ниже критической. Выбору размера области уделялось особое внимание. Проводились предварительные расчеты, из которых размеры области определялись таким образом, чтобы граница жидкость-пар не исчезала в результате испарения раньше времени достижения критической температуры. И наоборот, чтобы вся область не была раньше времени заполнена расширившейся жидкостью. По этой причине размеры области, в которой находится образец, по оси  $x$  выбирались больше, чем размеры образца. Размер всей области составил 64 нм, в которой атомы образца занимают 10 нм.

Серия вычислительных экспериментов начиналась процедурой релаксации частиц при температуре 0.30 кК и нулевом давлении, которое поддерживалось баростатом Берендсена [40]. В результате этой процедуры в системе устанавливается термодинамическое равновесие, и область оказывалась подготовлена к дальнейшим вычислительным экспериментам. После процедуры релаксации осуществлялся нагрев образца с помощью термостата посредством изменения текущей температуры  $T$  на величину  $\Delta T$ . В приводимой серии экспериментов начальная температура задавалась  $T = 4.8$  кК, нагрев проводился относительно быстро, за 150 пс при нулевом давлении, которое поддерживалось включенным баростатом. На каждом следующем шаге эксперимент повторялся при более высоком значении температуры. Максимальная температура нагрева составила  $T = 10.0$  кК. С повышением температуры нагрев замедлялся: время нагрева увеличивалось до 1.5 нс, шаг нагрева уменьшался. Каждый шаг нагрева сопровождался измерением температуры, плотности, давления.

По результатам МД моделирования формировались ветви бинодали путем усреднения плотности по времени и по пространству. Во всех расчетах после каждого изменения температуры система на время  $t = 1$  нс оставалась без изменений. В течение этого времени производилось усреднение плотности по времени. Плотность усреднялась также и по пространству. Представим эту

процедуру на следующем примере. На рис. 1 показаны пространственные распределения плотности золота при двух температурах  $T = 6.55$  кК и  $T = 7.05$  кК, усредненные по времени. На графике видно, что для температуры  $T = 6.55$  кК четко выделяются два пространственных диапазона  $x_1 \in (-25, -15)$  нм и  $x_2 \in (-10, 20)$  нм, в которых отмечаются колебания вокруг двух разных значений плотности. В каждом из этих диапазонов плотность усреднялась по пространству. В первом диапазоне  $x_1$  получена средняя плотность  $\bar{\rho}_1 = 1.2507$  г/см<sup>3</sup>, а во втором диапазоне  $x_2$  –  $\bar{\rho}_2 = 6.458$  г/см<sup>3</sup>. Оба значения плотности соответствуют одной и той же температуре.

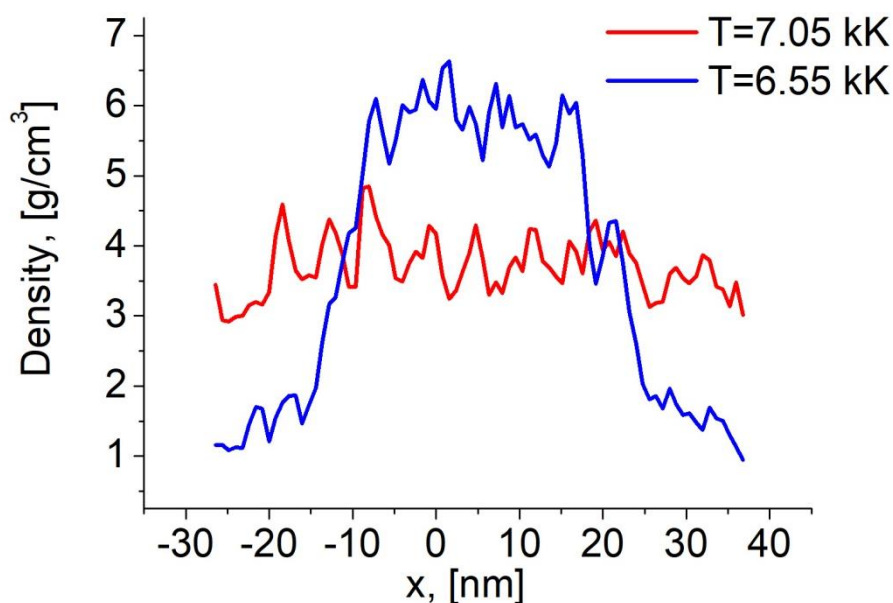


Рис. 1. Пространственное распределение плотности золота, усредненной по времени.

Первое значение принадлежит жидкостной, а второе – паровой ветви бинадали при температуре  $T = 6.55$  кК. На кривой, соответствующей плотности золота при температуре  $T = 7.05$  кК (рис.1), сложно выделить пространственные диапазоны, соответствующие какой-то определенной фазе.

Колебания плотности происходят вокруг одного среднего значения  $\bar{\rho} \approx 3.8$  г/см<sup>3</sup>, то есть плотность жидкости и пара золота примерно одинаковы в этой области, и вещество при  $T = 7.05$  кК находится в области метастабильных состояний, а температура близка критической. Полученные путем подобного усреднения ветви кривой фазового равновесия жидкость-пар были нанесены на плоскости  $\rho - T$  (рис.2).



### 3. Критическая температура $T_{cr}$ и критическое давление $P_{cr}$

Положение на фазовой диаграмме критической точки перехода жидкость-пар является одним из фундаментальных параметров. По результатам МД моделирования были получены критическая температура  $T_{cr}$  и критическое давление  $P_{cr}$ .

Для получения значения критической температуры  $T_{cr}$  использовался метод среднего размера кластеров в критической области [43]. Суть метода сводится к следующему. В докритической области с ростом температуры растут плотность и давление насыщенного пара. В околоскритической области атомарные частицы пара начинают объединяться в кластеры, которые достигают максимальных размеров как раз в критической точке. С дальнейшим ростом температуры плотность уже не растет. При этом из-за возрастания кинетической энергии хаотического движения начинается дробление кластеров на более мелкие. Таким образом, средний размер кластера должен иметь особенность в критической точке. Этот факт используется в данном методе для определения критической температуры.

Среднее число атомарных частиц, образующих кластер, можно оценивать по формуле

$$\langle N \rangle = \frac{n(T)k_B T}{P_v(T)}, \quad (2)$$

где  $P_v(T)$  – давление насыщенных паров при данной температуре  $T$ ,  $n(T)$  – концентрация атомарных частиц в насыщенном паре.

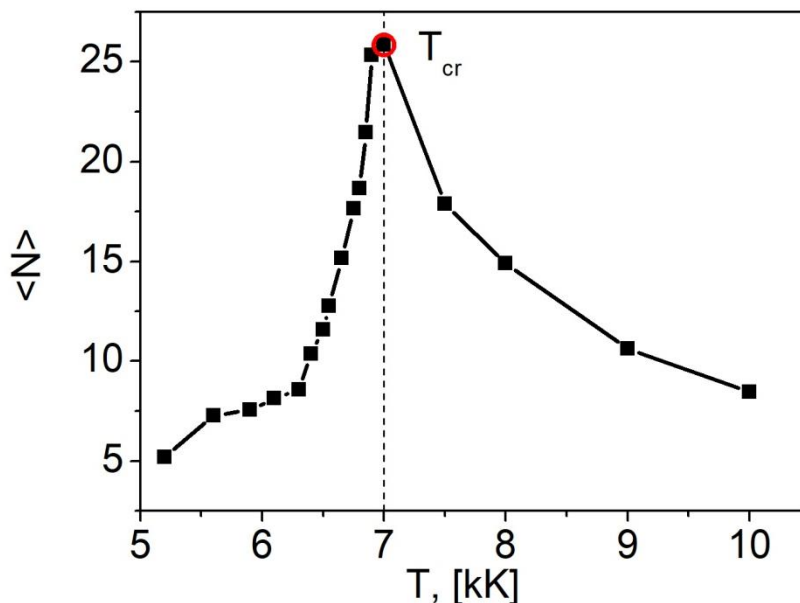


Рис.2. Зависимость размера кластера от температуры.

Температурная зависимость среднего размера кластера представлена на рис.2. График зависимости  $\langle N \rangle$  от температуры имеет характерный излом в критической точке. Таким образом, по методу среднего размера кластеров было найдено значение критической температуры  $T_{cr} \approx 7.0$  кК.

По результатам МД моделирования получена также температурная зависимость давления насыщенного пара  $P_v$  путем осреднения результатов по времени и пространству (рис.3). Анализируя зависимость давления насыщенного пара от температуры можно определить критическое давление (при известной критической температуре). При критической температуре  $T_{cr} = 7.0$  кК давление насыщенного пара  $P_{cr} \approx 0.134$  ГПа.

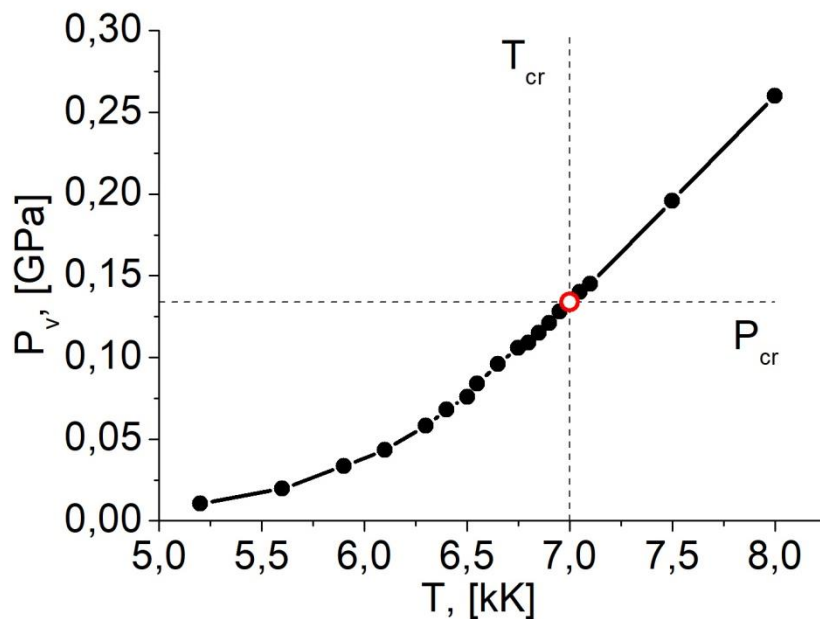


Рис.3. Температурная зависимость давления насыщенного пара.

При переходе через критическую точку происходит смена поведения температурной зависимости насыщенного пара  $P_v(T)$ : сильно неидеальный насыщенный пар, описываемый экспонентой в докритической области, трансформируется в идеальный с линейной зависимостью в закритической области.

#### 4. Кривая сосуществования жидкость-пар и критические параметры золота

По результатам МД моделирования получена кривая сосуществования жидкость-пар, представленная на рис. 4. Однако определение критического значения плотности из-за колебаний вызывает затруднения.

Для уточнения значения критической плотности было использовано эмпирическое правило прямолинейного диаметра [5]

$$\rho_L + \rho_v = 2\rho_{cr} + \lambda(T_{cr} - T), \quad (3)$$

где  $\rho_L$  плотность жидкой фазы при температуре  $T$ ,  $\rho_v$  – плотность насыщенного пара, находящегося в равновесии с жидкой фазой при той же температуре. Коэффициент  $\lambda$  отличается для различных веществ и имеет положительное значение близкое к 1.

Название становится понятным, если принять во внимание, что в координатах  $\rho - T$  диаметр кривой  $\rho(T)$  является прямой линией. При  $T \approx T_{cr}$  правило прямолинейного диаметра имеет вид

$$\rho_{cr} \approx \frac{\rho_L + \rho_v}{2} \quad (4)$$

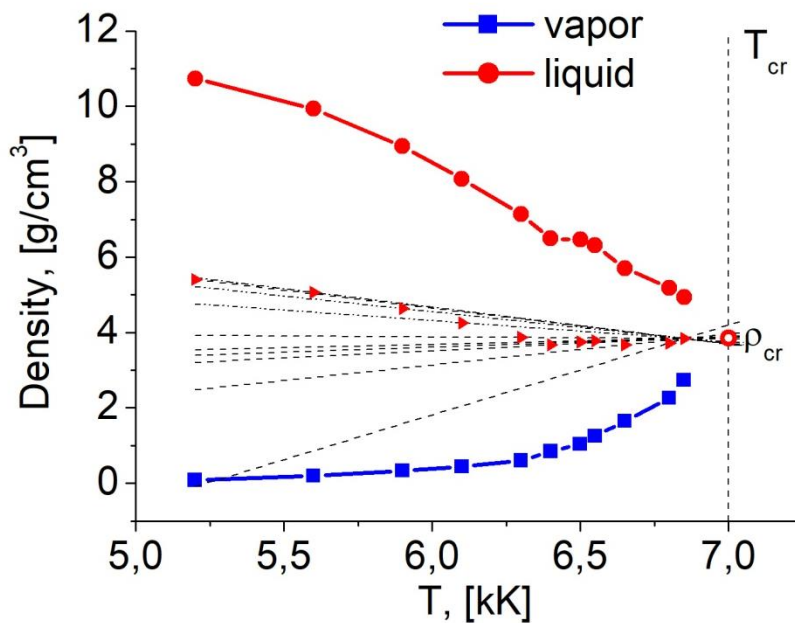


Рис.4. Бинодаль золота.

Полученные ветви бинодали не являются симметричными, поэтому для уточнения критической плотности используется модификация правила прямолинейного диаметра, хорошо зарекомендовавшая себя в [44]. Для построения прямой линии достаточно двух точек  $D_1(T_1, \rho_{Lv1})$  и  $D_2(T_2, \rho_{Lv2})$ , ординатами которых будут значения, вычисленные по формуле (4) при определенной температуре. В качестве первой точки выбираются значения бинодали при максимальной температуре  $T_1 = 6.85 \text{ kK}$ , допускающей ещё определение плотности. Для температуры  $T_1 = 6.85 \text{ kK}$  ордината вычисляется по формуле (4) по значениям  $\rho_L(6.85)$  и  $\rho_v(6.85)$ . Для определения второй точки  $D_2(T_2, \rho_{Lv2})$  прямолинейного диаметра можно выбрать любое из значений  $T < T_1$  и соответствующую этой температуре пару значений плотностей жидкостной и паровой ветвей бинодали. Всего было рассчитано 11 вариантов для определения координат второй точки и построено 11 вариантов линий прямолинейного диаметра, проходящих через точку  $D_1(6.85; \rho(6.85))$  и,



твердофазными свойствами [23]. А также оценки, полученные из полуэмпирических уравнений состояния [26] и с использованием метода изохорного коэффициента [28], в результате молекулярного моделирования с помощью многочастичного силового поля, известного как квантово-скорректированный потенциал Саттона-Чена [35]. В таблице представлены также относительные отклонения критических параметров, полученных в настоящей работе от этих альтернативных оценок

$$\sigma_{T_{cr}} = \frac{T_{cr,N} - T_{cr,12}}{T_{cr,N}} \quad \sigma_{\rho_{cr}} = \frac{\rho_{cr,N} - \rho_{cr,12}}{\rho_{cr,N}} \quad \sigma_{P_{cr}} = \frac{P_{cr,N} - P_{cr,12}}{P_{cr,N}}$$

где  $N=1, \dots, 11$  – номер значения критических параметров в таблице 1,  $T_{cr,N}$ ,  $\rho_{cr,N}$ ,  $P_{cr,N}$  – критические параметры других авторов, для настоящей работы  $N = 12$ .

Как видно из таблицы 1, критические температура, плотность и давление, полученные в настоящей работе, неплохо согласуются с результатами других исследований. Наиболее близки к полученным результатам значения  $T_{cr}$  из работ [12-14], полученных из эксперимента, отличие составляет  $\sim 3-7\%$ . Полученные из альтернативных вычислений [15, 20-23, 26] значения  $T_{cr}$  отличаются от наших вычислений  $\sim 15-20\%$ . Наибольшее различие с результатами работ [28, 35]. Оценки критической температуры в эти работах получены с использованием метода изохорного коэффициента [28] и из результатов молекулярного моделирования с помощью квантово-скорректированного потенциала Саттона-Чена [35]. Разброс отклонения значений критической плотности, так же как и значений  $T_{cr}$ , невелик и составляет  $\sim 8-36\%$ . Исключение составляют результаты [13] ( $\approx 50\%$ ). Достаточно сильно отличаются оценки критического давления. Кроме экспериментальной работы [12] (отклонение  $\sim 3.88\%$ ) полученное значение  $P_{cr}$  отличается от других работ на  $\approx 80\%$ . Объяснить это можно тем, что давление является наиболее чувствительной характеристикой вещества, реагирующей на любые изменения в системе. Полученные результаты находятся в хорошем соответствии с экспериментальными результатами работ [12,14].

## Заключение

1. На основе проведенной серии вычислений с использованием молекулярно-динамического моделирования была получена кривая сосуществования жидкость–пар и определены критические параметры золота: температура, плотность и давление с использованием потенциала взаимодействия частиц из семейства EAM [34].
2. Значение критической температуры  $T_{cr}$  определялось по результатам МД моделирования с использованием метода среднего размера кластеров в критической области [43].
3. Определение критического значения плотности (по результатам МД моделирования) из кривой бинодали из-за сильных колебаний плотности

вблизи критической температуры осуществлялось с использованием эмпирической процедуры прямолинейного диаметра [5,44].

4. Сравнение результатов моделирования данной работы с результатами оценок критических параметров золота, полученных из экспериментов [12-14], а также полученных другими исследователями, использовавшими различные подходы [15, 20-23, 26,28,35], показало неплохое совпадение.

### **Библиографический список**

1. Elahi Narges, Kamali Mehdi, Baghersad Mohammad Hadi. Recent biomedical applications of gold nanoparticles: A review // *Talanta*, 2018, v. 184, 537-556, doi: 10.1016/j.talanta.2018.02.088.
2. Шкиров В.П. Метастабильная жидкость. М.: Наука, 1972.
3. Кириллин В.А., Сычев В.В., Шейдлин А.Е. Техническая термодинамика. М.: Издательство МЭИ, 2008.
4. Hensel F. 35 years Liquid Metals conferences: what do we and what do we not yet understand about liquid metals // *J. Non-Cryst. Solids*, 2002, **312–314**, 1–7.
5. Вукалович М.П., Новиков И.И. Термодинамика. М.: Машиностроение, 1972.
6. Winter R., Pilgrim C., Hensel F., Morkel C., Gläser W. Structure and dynamics of expanded liquid alkali metals // *J. Non-Crystalhne Sohds*, 1993, №156-158, 9-14
7. Hensel F., Marceca E., Pilgrim W.C. The metal-non-metal transition in compressed metal vapours // *J. Physics: Condensed Matter*, 1998, v.10, №49, 11395-11404. doi: 10.1088/0953-8984/10/49/026
8. Hensel F., Hohl G.F., Schaumlöffel D., Pilgrim W.C., Franck E.U. Empirical regularities in behaviour of the critical constants of fluid alkali metals // *Z. Phys. Chem.*, 2000, v.214, №6, 823–831.
9. Jüngst J., Knuth B., Hensel F. Observation of singular diameter in the coexistence curve of metals // *Phys. Rev. Lett.*, 1985, v.55, 2160–2163.
10. Gathers, G. R. Dynamic methods for investigating thermophysical properties of matter at very high temperatures and pressures // *Reports on Progress in Physics*, 1986, v.49, №4, 341–396. doi:10.1088/0034-4885/49/4/001
11. Pottlacher, G. (Ed.). High Temperature Thermophysical Properties of 22 Pure Metals. Pab.: Edition keeper, 2010.
12. Мартынюк М.М. Параметры критической точки металлов. *Ж. физ.химии*, 1983, т.57, №. 4, с.810-821
13. Boboridis K., Pottlacher G., and Jager H. Determination of the Critical Point of Gold // *International Journal of Thermophysics*, 1999, v. 20, No. 4, 1289-1297.
14. Pottlacher G., & Schröer W. Estimation of critical data and phase diagrams of pure molten metals // *High Temperatures, High Pressures*, 2014, 201-215.
15. Fortov V. E., Dremin A. N., Leont'ev A. A. Evaluation of the parameters of the critical point // *High Temperature*, 1975, v.13, №5, 984–992.

16. Likalter A.A. On the critical parameters of metals // *High Temperature*, 1985, v.23, №3, 371–377.
17. Lang G. Critical temperatures and temperature coefficients of the surface tension of liquid metals // *Zeitschrift fuer Metallkunde*, 1977, v.68, №3, 213-218.
18. Apfelbaum E.M., Vorob'ev V.S. The similarity relations set on the basis of symmetrization of the liquid – vapor phase diagram // *J. Phys. Chem. B*, 2015, v.119, 8419.
19. Apfelbaum E.M. and Vorob'ev V.S. The Wide-Range Method to Construct the Entire Coexistence Liquid–Gas Curve and to Determine the Critical Parameters of Metals // *J. Phys. Chem. B*, 2015, v.119, №35, 11825–11832.
20. Blairs Sidney, Abbasi Mohammad Hassan. Correlation between surface tension and critical temperatures of liquid metals // *Journal of Colloid and Interface Science*, 2006, v.304, 549–553.
21. Kaptay, G. On the Order–Disorder Surface Phase Transition and Critical Temperature of Pure Metals Originating from BCC, FCC, and HCP Crystal Structures // *Int. J. Thermophys*, 2012, v.33, 1177–1190.
22. Alexander L. Khomkin, Aleksey S. Shumikhin. The thermodynamics and transport properties of transition metals in critical point // *High Temp.- High Press.*, 2017, v. 46, No. 4-5, 367-380.
23. Kanno, H. New empirical formula for estimating critical temperature of element from solid properties // *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*, 1976, v.38, №8, 1573-1575.
24. Likalter A.A. Critical points of metals of three main groups and selected transition metals // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2002, v.311, 137-149.
25. Al'tshuler L. V., Bushman A. V., Zhernokletov M. V., Zubarev V. N., Leont'ev A. A., and Fortov V.E. Unloading isentropes and the equation of state of metals at high energy densities // *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 1980, v.78, 741-760.
26. Young D.A., Alder B.J. Critical point of metals from the van der Waals model // *Phys. Rev. A*, 1971, v.3, №1, 364-371.
27. Likalter A. A. Equation of state of metallic fluids near the critical point of phase transition // *Phys. Rev. B*, 1996, v.53, 4386.
28. Blairs S., Abbasi Mh. Internal-pressure approach for the estimation of critical-temperatures of liquid-metals // *Acustica*, 1993, v.79, №1, 64-72.
29. Mazhukin V.I., Samokhin A.A., Demin M.M., Shapranov A.V. Explosive boiling of metals upon irradiation by a nanosecond laser pulse // *Quantum Electronics*, 2014, v.44, №4, 283–285.
30. Mazhukin V.I., Samokhin A.A., Shapranov A.V., Demin M.M. Modeling of thin film explosive boiling – surface evaporation and electron thermal conductivity effect // *Mater. Res. Express*, 2015, v.2, №1, 016402 (1-9).
31. Cao Q.-L., Wang P.-P., Huang D.-H., Li Q., Wang F.-H., Cang Cai L. Pressure Dependence of Fusion Entropy and Fusion Volume of Six Metals // *J. Chem. Eng. Data*, 2013, v.58, №1, 64–70.

32. Shugaev M.V., Shih C.Y., Karim E.T., Wu C., Zhigilei L.V. Generation of nanocrystalline surface layer in short pulse laser processing of metal targets under conditions of spatial confinement by solid or liquid overlayer // *Appl. Surf. Sci.*, 2017, v.417, 54-63.
33. Zhukhovitskii D. I., Zhakhovsky V. V. Thermodynamics and the structure of clusters in the dense Au vapor from molecular dynamics simulation // *J. Chem. Phys.*, 2020, v.152, 224705. doi: 10.1063/5.0010156
34. Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Petrov Yu.V., Ashitkov S.I., Nishihara K. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials // *Appl. Surf. Sci.*, 2009, v.255, 9592–9596. doi:10.1016/j.apsusc.2009.04.082
35. Desgranges Caroline, Widhalm Leanna, and Delhommelle Jerome. Scaling Laws and Critical Properties for FCC and HCP Metals // *J. Phys. Chem. B*, 2016, 1-24.
36. Apfelbaum E.M., Vorob'ev V. S. The Zeno line for Al, Cu, and U // *J. Phys. Chem. B*, 2016, v.120, 4828–4833.
37. Singh J.K., Adhikari J., Kwak S.K. Vapor–liquid phase coexistence curves for Morse fluids // *Fluid Phase Equilib.*, 2006, v.248, 1-6.
38. Демин М.М., Алексашкина А.А., Королева О.Н. Атомистическое моделирование характеристик золота в области фазового перехода плавления-кристаллизация // *Препринты ИПМ*, 2020, №1. doi: 10.20948/prepr-2020-1.
39. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *J. Comput. Phys.*, 1995, v.117, №1, 1-19.
40. Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., Gunsteren W.F. van, DiNola A., Haak J.R. Molecular dynamics with coupling to an external bath // *J. Chem. Phys.*, 1984, v.81, 3684 – 3690.
41. Allen M.P. and Tildesley D.J. *Computer Simulation of Liquids* // Oxford: Clarendon Press, 2002.
42. Verlet L. Computer “Experiments” on Classical Fluids // I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules, *Phys. Rev.*, 1967, v.159, 98-103.
43. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Koroleva O.N., Rudenko A.V. Molecular dynamics simulation of critical point parameters for silicon // *Math. Montis.*, 2014, v.31, 56-76.
44. Demin M.M., Koroleva O.N., Shapranov A.V., Aleksashkina A.A., Atomistic modeling of the critical region of copper using a liquid-vapor coexistence curve // *Math. Montis.*, 2019, v.46, 52-61. doi: 10.20948/mathmontis-2019-46-6



## Оглавление

Введение .....	3
1. Математическая формулировка задачи .....	5
2. Вычислительный алгоритм. ....	6
3. Критическая температура $T_{cr}$ и критическое давление $P_{cr}$ .....	8
4. Кривая сосуществования жидкость-пар и критические параметры золота .....	9
Заключение.....	12
Библиографический список.....	13