

И.В. МАКЛАШОВА, Ю.А. БОГДАНОВА

*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»*

## **ПОЛУЧЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ГИДРИДА АЛЮМИНИЯ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНО- И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Предложена методика определения параметров уравнения состояния гидридов металлов на примере  $\text{AlH}_3$  в широком диапазоне давления и температур для расчета теплофизических и механических свойств на основе молекулярно-динамического и термодинамического моделирования.

I.V. MAKLASHOVA, Yu.A. BOGDANOVA

*National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute)*

## **OBTAINING PARAMETERS OF THE EQUATION OF STATE OF ALUMINUM HYDRIDE BASED ON MOLECULAR AND THERMODYNAMIC MODELING**

A method for determining the parameters of the equation of state of metal hydrides using  $\text{AlH}_3$  as an example in a wide range of pressures and temperatures is proposed for calculating thermophysical and mechanical properties based on molecular dynamic and thermodynamic modeling.

Целью данной работы является разработка методики определения параметров уравнения состояния гидрида алюминия для описания теплофизических и механических свойств гидрида в широком диапазоне давления и температур.

Расчет теплофизических и механических свойств гидридов металлов проводится на основе молекулярно-динамического и термодинамического моделирования. различных потенциалов межатомного и межмолекулярного взаимодействия. Методом молекулярной динамики в программном пакете LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [1] были рассчитаны изотермы в диапазоне давлений до 30 ГПа с использованием многочастичного потенциала погруженного атома и реакционного силового поля ReaxFF [2]. Молекулярно-динамическое моделирование позволяет следить за фазовым и химическим состоянием вещества. Для интерпретации фазового состояния используются функции радиального распределения и среднее квадратичное отклонение атомов.

Термодинамическое моделирование позволяет выполнять массовые расчеты теплофизических, термодинамических и механических свойств вещества.

*Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики, направление № 8 «Физика изотопов водорода». Этап 2026-2028).*

### *Список литературы*

1. The classical molecular dynamics package LAMMPS [Электронный ресурс] / <http://lammps.sandia.gov>. 2004.
2. J. G. O. Ojwang. Parametrization of a reactive force field for aluminum hydride. // J. Chem. Phys. 131, 044501 (2009)