

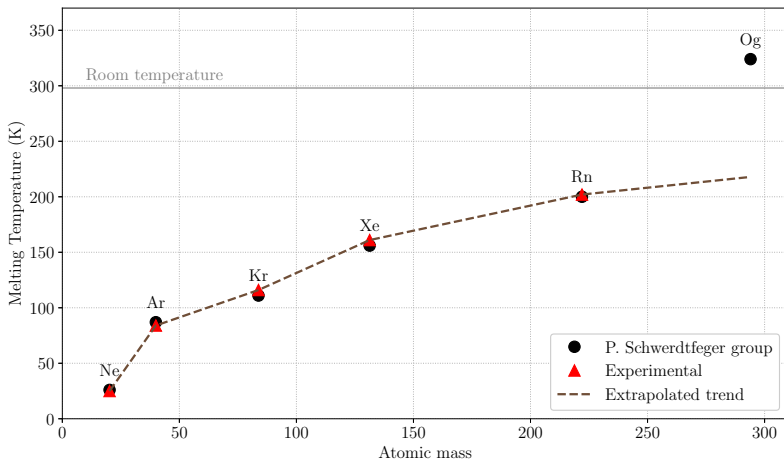
Расчет температуры плавления оганесона с помощью метода молекулярной динамики

Н.К. Дулаев^{1,2}, Д.П. Усов¹, А.М. Рыжков^{1,2},
Л.В. Скрипников^{2,1}, И.И. Тупицын¹, В.М. Шабаев^{1,2}

¹Санкт-Петербургский государственный университет

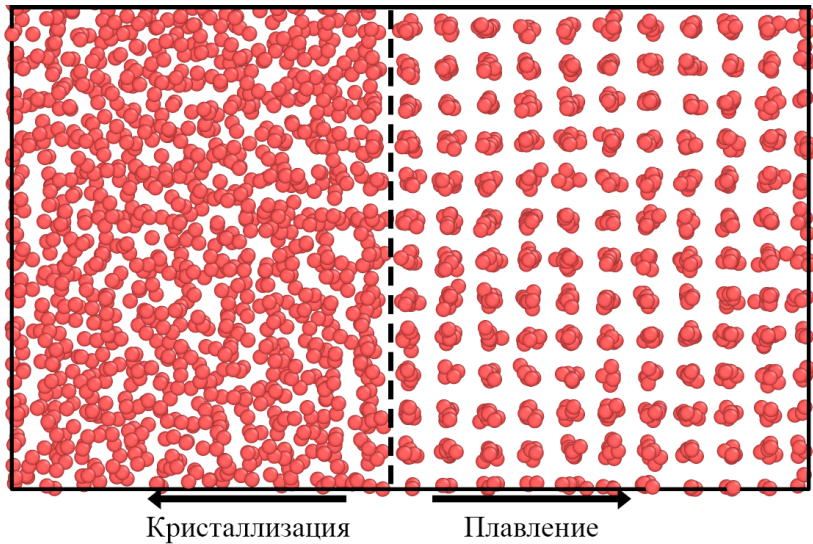
²Петербургский институт ядерной физики им.
Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт»

Температуры плавления благородных газов



O.R. Smits, J.-M. Mewes, P. Jerabek, and P. Schwerdtfeger,
Angew. Chem. Int. Ed. **59**, 23636 (2020)

Метод сосуществования фаз



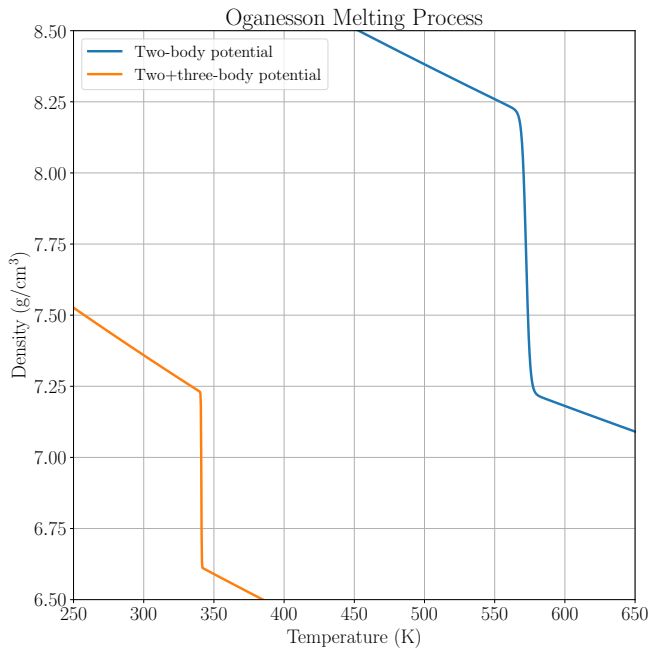
Потенциал взаимодействия

Многочастичный потенциал взаимодействия $E_{\text{int}}(N)$ для системы из N атомов может быть разложен в суммы по всем возможным двухчастичным $E^{(2)}$, трехчастичным $E^{(3)}$ вкладам и вкладам высших порядков:

$$E_{\text{int}}(N) = \sum_{i < j}^N E^{(2)}(r_{ij}) + \sum_{i < j < k}^N E^{(3)}(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}) + \dots \quad (1)$$

Для сравнения результатов расчетов температуры плавления потенциалы были взяты из работы O.R. Smits *et al.* и реализованы в программе LAMMPS.

Результаты



Результаты

	O.R. Smits <i>et al.</i>	Данная работа
2-body	555	570
ΔT (3-body)	-230	-240
2+3-body	325	330

Таблица 1: Сравнение температур плавления оганесона (K) из периодических симуляций для ячейки из 256 атомов: результаты статьи O.R. Smits *et al.* и данной работы.

Результаты

Элемент	Данная работа	P. Schwerdtfeger <i>et al.</i>	Эксперимент
Неон	25	26	25
Аргон	84	87	84
Криптон	116	111	116
Ксенон	160	156	161
Радон	202	200	202
Оганесон	336	324	-

Таблица 2: Итоговые температуры плавления элементов из группы благородных газов (в К), рассчитанные в данной работе (второй столбец), в работах группы P. Schwerdtfeger (третий столбец) и полученные экспериментально (четвертый столбец).

Заклучение

