

ДИНАМИКА АТОМОВ ЖИДКОГО ЛИТИЯ. ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛ И ПОТЕНЦИАЛЫ ЕАМ-ТИПА

*Р. М. Хуснутдинов**, *Б. Н. Галимзянов*, *А. В. Мокшин***

*Казанский (Приволжский) федеральный университет
420008, Казань, Россия*

Поступила в редакцию 22 августа 2017 г.

Общепринятым считается, что сложный характер межчастичного взаимодействия в жидких металлах наиболее корректно воспроизводится многочастичными потенциалами межчастичного взаимодействия ЕАМ-типа (модель «погруженного атома», embedded atom model). Показано, что в случае жидкого лития вблизи температуры плавления ($T_m = 453.65$ К) сферический псевдопотенциал дает лучшее согласие с экспериментальными данными по упругому и неупругому рассеянию рентгеновских лучей по сравнению с известными ЕАМ-потенциалами. Расчеты динамического структурного фактора, спектральных плотностей продольного и поперечного потоков атомов позволяют установить, что хотя псевдопотенциал и ЕАМ-потенциалы генерируют определенное качественное соответствие в особенностях коллективной динамики, тем не менее межчастичное взаимодействие сферического типа верно воспроизводит как общую форму динамического структурного фактора на интервале волновых чисел, так и закон дисперсии коллективных возбуждений.

DOI: 10.7868/S0044451018010091

1. ВВЕДЕНИЕ

По сравнению с другими щелочными металлами литий обладает наиболее простой электронной структурой $1s^2 2s^1$: двумя внутренними s -электронами и одним s -валентным электроном. По количеству нуклонов и электронов литий может считаться самым простым металлом, существующим в природе [1, 2]. Тем не менее многие свойства расплава лития являются весьма нетривиальными, что обусловлено специфическим характером ион-ионного взаимодействия [3] даже по сравнению с другими жидкими щелочными металлами. Так, в случае лития потенциалы, построенные на основе локального псевдопотенциала (например, потенциал Эшкрофта [4]), оказываются не подходящими для воспроизведения как структуры, так и динамики, в то время как в случае других щелочных металлов такие потенциалы дают хорошее согласие с экспериментом в широком диапазоне температур. Отчасти это обусловлено тем, что количество проводящих электронов в литии составляет около 33 % от их общего числа,

тогда как для натрия и цезия, например, эта величина составляет соответственно 9 % и 1.8 %. Далее, литий практически не смешивается с другими щелочными элементами, в то время как другие щелочные металлы способны к формированию однородных смесей (в качестве примеров можно привести натрий-калиевый, цезий-рубидиевый, цезий-калиевый сплавы) [5]. По сравнению с другими щелочными металлами литий обладает большей химической стойкостью, и с многими нещелочными металлами литий образует соединения, обладающие высокой температурой плавления и большой твердостью [6]. Благодаря высокой теплоемкости и теплопроводности, широкому температурному интервалу жидкого состояния, малым вязкости и плотности жидкий литий очень эффективно может быть использован в качестве теплоносителя в урановых реакторах при производстве атомной энергии [7].

Для воспроизведения межчастичного взаимодействия жидкого лития были предложены различные модельные потенциалы: локальные [8, 9] и нелокальные [10, 11], эффективные [12] сферические псевдопотенциалы (см. обзор [13]), многочастичные потенциалы ЕАМ-типа (потенциалы «погруженного» атома) [14, 15] и их модификации — МЕАМ-потенциалы (modified embedded atom model) [16]. Примечательно, что в соответствии с многими методами по

* E-mail: khrm@mail.ru

** E-mail: anatolii.mokshin@mail.ru

развитию потенциалов межчастичного взаимодействия его (потенциала) параметры изначально подбираются таким образом, чтобы максимально корректно воспроизводить отдельные области фазовой диаграммы, а также структурные свойства. При этом, очевидно, что «правильная» структура совсем не подразумевает генерирования потенциалом корректной динамики и транспортных свойств. Ключевой целью данной работы является исследование того, насколько верно потенциалы межчастичного взаимодействия — эффективный сферический псевдопотенциал [12], потенциал погруженного атома (многочастичный ЕАМ-потенциал) [15] и модифицированный потенциал погруженного атома (МЕАМ-потенциал) [16] — описывают структуру и микроскопическую динамику жидкого лития вблизи температуры плавления.

2. СТРУКТУРА И КОЛЛЕКТИВНАЯ ДИНАМИКА АТОМОВ ЛИТИЯ

Рассматривается равновесный расплав лития при температуре $T = 475$ К с концентрацией $\rho = 0.0445 \text{ \AA}^{-3}$. Данное (ρ, T) -состояние находится вблизи кривой плавления, и для него в настоящее время имеются достаточный экспериментальный материал как по структуре, так и атомарной коллективной динамике [17]. Система состоит из $N = 4394$ частиц, находящихся в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. В качестве начальных условий используется конфигурация частиц, соответствующая ОЦК-решетке кристаллического лития с постоянной решетки $a = 3.555 \text{ \AA}$ с нулевыми значениями скоростей и ускорений. Рассматриваются три различных модельных потенциала межчастичного взаимодействия: сферический псевдопотенциал [12], многочастичный ЕАМ-потенциал [15] и МЕАМ-потенциал [16]. Детали и характеристики, используемых в работе потенциалов, представлены в Приложении. Интегрирование уравнений движений выполнено по схеме Верле в скоростной форме с временным шагом $\tau = 10^{-15}$ с [18]. Для приведения систем в состояния термодинамического равновесия и расчета спектральных характеристик было выполнено соответственно 100000 и 2000000 временных шагов.

2.1. Структурные особенности расплава лития

Как упоминалось во Введении, наиболее распространенным способом проверки корректности потенциала межатомного взаимодействия является

расчет радиальной функции распределения атомов [19, 20]

$$g(r) = \frac{V}{4\pi r^2 N} \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{\Delta n_i(r)}{\Delta r} \right\rangle \quad (1)$$

и статического структурного фактора

$$S(k) = 1 + \frac{N}{V} \int [g(r) - 1] \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2)$$

и сравнение этих величин с экспериментальными данными по дифракции рентгеновских лучей [21]. Здесь V — объем системы, \mathbf{k} и \mathbf{r} — волновой вектор и радиус-вектор, определяющий положение частицы, $\Delta n_i(r)$ — число частиц в сферическом слое толщиной Δr на расстоянии r от i -й частицы.

На рис. 1 функции $g(r)$ и $S(k)$ для жидкого лития при температуре $T = 475$ К, вычисленные на основе различных потенциалов межатомного взаимодействия, сравниваются с экспериментальными данными по дифракции рентгеновских лучей [21]. На рисунках видно, что два модельных потенциала — парный псевдопотенциал [12] и ЕАМ-потенциал [15] — в целом лучше согласуются с экспериментальными данными по дифракции рентгеновских лучей [21], чем МЕАМ-потенциал [16].

2.2. Микроскопическая коллективная динамика жидкого лития

Коллективная динамика частиц жидкости характеризуется экспериментально измеряемой величиной — динамическим структурным фактором $S(k, \omega)$. Величина $S(k, \omega)$ может быть также найдена на основе траекторий частиц, оцениваемых с помощью моделирования атомарной/молекулярной динамики [22]:

$$S(k, \omega) = \frac{1}{2\pi N} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \times \sum_{l,j} \langle \exp[-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l(0)] \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j(t)] \rangle dt. \quad (3)$$

Здесь угловые скобки обозначают усреднение по числу частиц и временным выборкам.

Для сравнения результатов моделирования с экспериментальными данными были определены спектры интенсивности рассеяния $I(k, \omega)$ рентгеновских лучей при различных значениях волнового числа k . Следует отметить, что интенсивность рассеяния $I(k, \omega)$ связана с динамическим структурным фактором $S(k, \omega)$ соотношением

$$I(k, \omega) = E(k) \int R(k, \omega - \omega') S_q(k, \omega') d\omega', \quad (4)$$

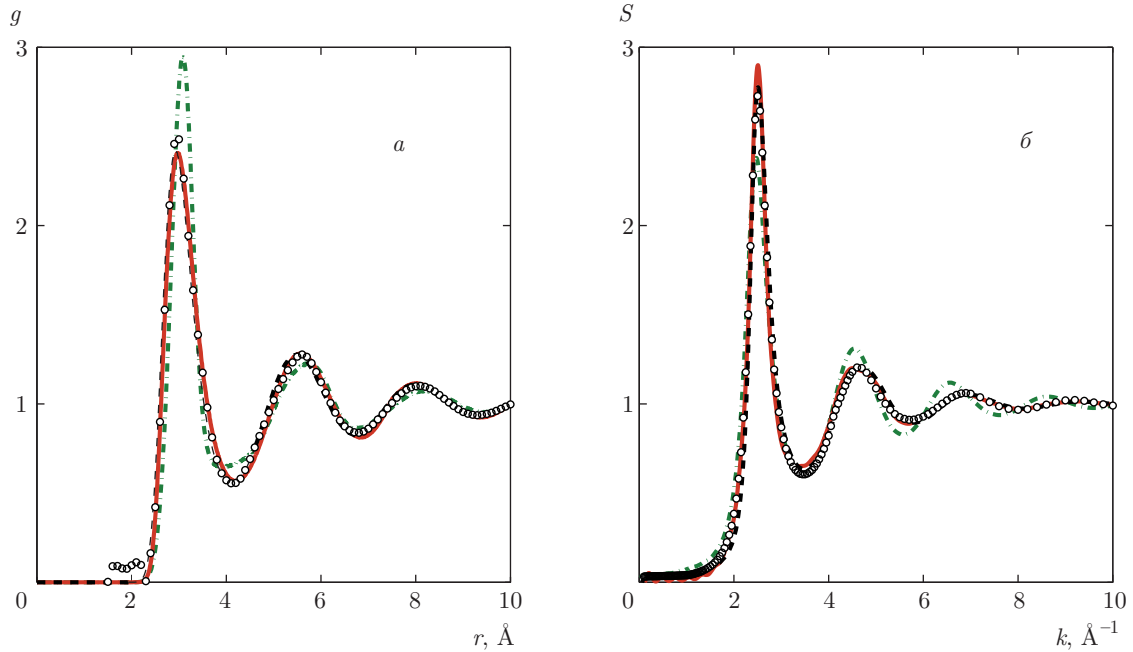


Рис. 1. (В цвете онлайн) *а*) Радиальная функция распределения атомов жидкого лития при температуре $T = 475$ К: штриховая, сплошная и штрихпунктирная линии представляют результаты моделирования атомарной динамики соответственно с эффективным псевдопотенциалом [12], с EAM-потенциалом [15] и модифицированным (MEAM) потенциалом «погруженного» атома [16]; точки — экспериментальные данные по дифракции рентгеновских лучей [21]. *б*) Статический структурный фактор расплава лития

$$S_q(k, \omega) = \frac{\hbar\omega/k_B T}{1 - \exp(-\hbar\omega/k_B T)} S(k, \omega), \quad (5)$$

где $S_q(k, \omega)$ — квантовый динамический структурный фактор, $E(k)$ — нормировочный множитель, $R(k, \omega)$ — функция экспериментального разрешения, которая представляет собой интенсивность рассеяния на пустом контейнере.

На рис. 2 спектры рассеяния рентгеновских лучей в жидком литии вблизи температуры плавления [23] сравниваются с результатами моделирования атомарной динамики на основе различных потенциалов межатомного взаимодействия. Весьма неожиданным является то, что результаты моделирования с псевдопотенциалом из работы [12] полностью согласуются с экспериментальными данными по рассеянию рентгеновских лучей и воспроизводят все особенности спектров $I(k, \omega)$. В то же время результаты моделирования с EAM-потенциалом [15] и MEAM-потенциалом [16] имеют существенные расхождения с экспериментальными данными [23].

Для детального анализа акустических коллективных возбуждений продольной и поперечной поляризации в жидком литии вблизи температуры плавления были рассчитаны спектральные плотности

$$\tilde{C}_\alpha(k, \omega) = \frac{k_B T}{\pi m} \int_0^\infty C_\alpha(k, t) e^{-i\omega t} dt, \quad (6)$$

$\alpha = L, T$

(m — масса частицы) нормированных временных корреляционных функций продольного,

$$C_L(k, t) = \frac{\left\langle \left(\mathbf{e}_k \cdot \mathbf{j}^*(k, 0) \right) \mathbf{e}_k \cdot \left(\mathbf{e}_k \cdot \mathbf{j}(k, t) \right) \mathbf{e}_k \right\rangle}{\left\langle \left| \mathbf{e}_k \cdot \mathbf{j}(k, 0) \right|^2 \right\rangle}, \quad (7)$$

и поперечного,

$$C_T(k, t) = \frac{\left\langle \left([\mathbf{e}_k \times \mathbf{j}^*(k, 0)] \cdot [\mathbf{e}_k \times \mathbf{j}(k, t)] \right) \right\rangle}{\left\langle \left| [\mathbf{e}_k \times \mathbf{j}(k, 0)] \right|^2 \right\rangle}, \quad (8)$$

потоков частиц [24]. Здесь круглыми и квадратными скобками обозначены соответственно скалярные и векторные произведения; величина $\mathbf{j}(k, t)$ есть микроскопический поток частиц, определяемый выражением [25]

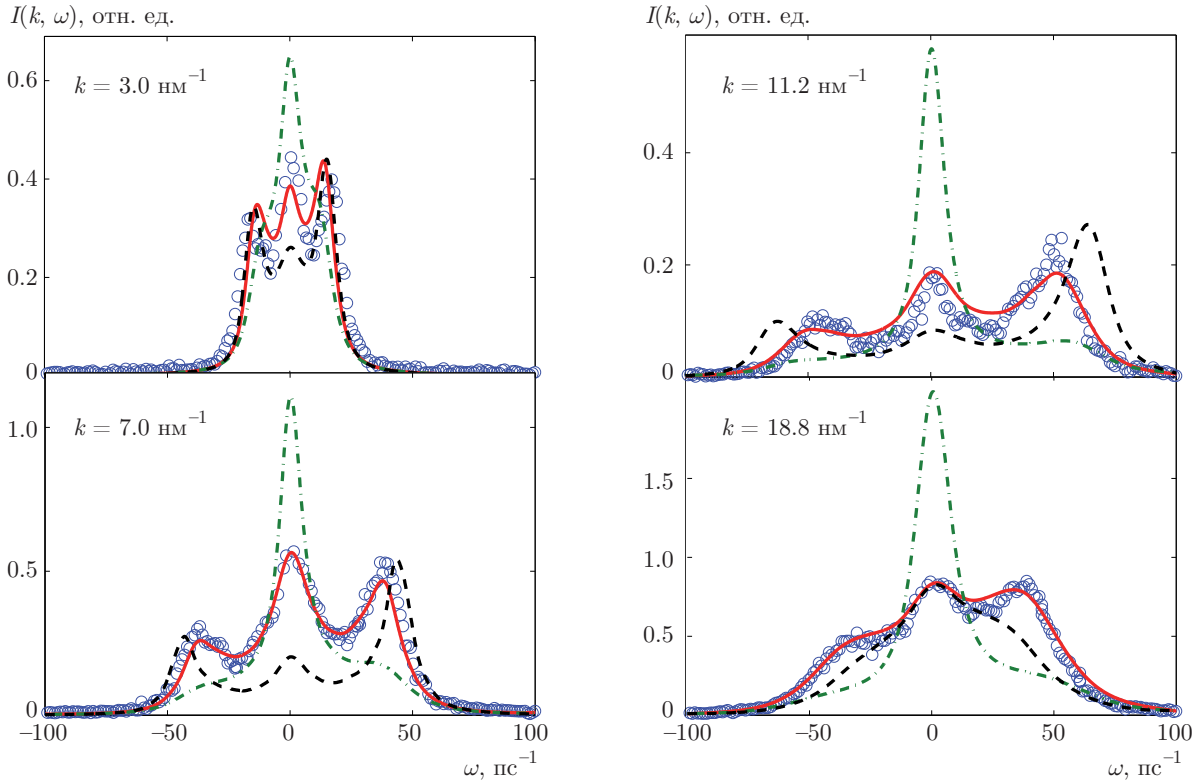


Рис. 2. (В цвете онлайн) Интенсивность рассеяния рентгеновских лучей в расплаве лития при температуре $T = 475$ К: точки — экспериментальные данные по неупругому рассеянию рентгеновских лучей [23]; сплошной, штриховой и штрихпунктирной линиями представлены результаты моделирования атомарной динамики соответственно с эффективным псевдопотенциалом [12], с EAM-потенциалом [15] и модифицированным (MEAM) потенциалом «погруженного» атома [16]. Для сопоставления расчетных кривых с экспериментальными результаты моделирования были преобразованы с учетом функции экспериментального разрешения из формулы (4) и уравнения (5)

$$\mathbf{j}(k, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l^N \mathbf{v}_l(t) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l(t)), \quad (9)$$

где $\mathbf{v}_l(t)$ — скорость l -й частицы в момент времени t , $\mathbf{e}_k = \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$. На рис. 3 представлены частотные спектры $\tilde{C}_L(k, \omega)$ и $\tilde{C}_T(k, \omega)$ для области значений волновых чисел, соответствующих $k < k_m/2$ и $k > k_m/2$. Здесь $k_m/2 = 1.25 \text{ \AA}^{-1}$ — граница первой псевдозоны Бриллюэна; $k_m = 2.5 \text{ \AA}^{-1}$ — положение главного максимума статического структурного фактора $S(k)$. Как видно на рисунке, в случае всех трех модельных потенциалов на спектрах $\tilde{C}_L(k, \omega)$ и $\tilde{C}_T(k, \omega)$ отчетливо проявляются максимумы в высокочастотной области. В то же время контуры спектров, положения пиков и их высоты (при фиксированном k) для разных потенциалов также имеют выраженные различия.

На рис. 4 представлены дисперсии коллективных возбуждений продольной и поперечной поля-

ризаций жидкого лития, полученные из вычисленных спектров¹⁾ $\tilde{C}_L(k, \omega)$, $\tilde{C}_T(k, \omega)$ и экспериментальных зависимостей $I(k, \omega)$. Как видно на рис. 4а, в области низких значений волновых чисел все результаты моделирования находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными по рассеянию рентгеновских лучей [23]. Кроме того, как результаты расчетов, так и данные эксперимента свидетельствуют о наличии в микроскопической области ($k < k_m/2$) так называемого эффекта положительной дисперсии скорости звука, когда значения $\omega_c^{(L)}(k)$ превышают величину, предписываемую гидродинамической теорией [26, 27] с линейной дисперсией $\omega_c^{(L)}(k) = c_s k$, где $c_s = 4554 \text{ м/с}$ — адиабатическая скорость распространения звука. В то же

¹⁾ Отметим, что спектральная плотность временной корреляционной функции продольного потока связана с динамическим структурным фактором соотношением $\tilde{C}_L(k, \omega) = (\omega^2/k^2)S(k, \omega)$.

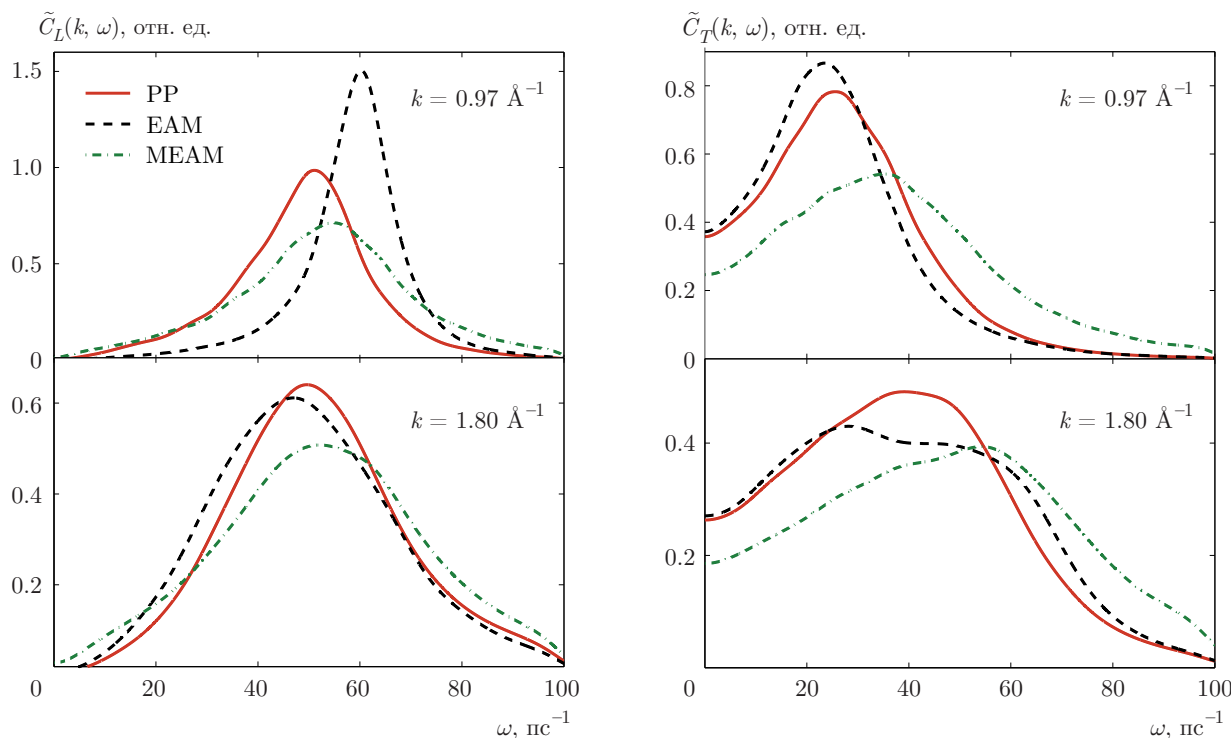


Рис. 3. Спектральные плотности временных корреляционных функций продольного $\tilde{C}_L(k, \omega)$ и поперечного $\tilde{C}_T(k, \omega)$ потоков для расплава лития при температуре $T = 475$ К, полученные на основе данных моделирования атомарной/молекулярной динамики с парным эффективным псевдопотенциалом (сплошная линия) [12] и многочастичными ЕАМ- и МЕАМ-потенциалами (соответственно штриховые и штрихпунктирные линии) [15, 16]

время на рис. 4а видно, что результаты моделирования с парным псевдопотенциалом [12] имеют лучшее согласие с экспериментальными данными [23] по сравнению с результатами расчетов, полученными на основе многочастичных потенциалов [15, 16].

На рис. 4б представлены результаты моделирования для дисперсии коллективных возбуждений поперечной поляризации $\omega_c^{(T)}(k)$. Вследствие отсутствия каких-либо экспериментальных данных по $\omega_c^{(T)}(k)$ для жидкого лития вблизи температуры плавления, судить о достоверности дисперсионных кривых поперечной поляризации не представляется возможным. Тем не менее можно сделать несколько качественных заключений. Во-первых, для всех рассмотренных потенциалов в коллективной динамике атомов лития отчетливо проявляются акустико-подобные коллективные возбуждения продольной поляризации с характерным законом дисперсии. Во-вторых, экстраполяция соответствующего закона дисперсии в область малых значений k указывает на наличие так называемой щели шириной k_0^T , где $\omega_c^{(T)}$ принимает нулевые значения [28].

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ВЫВОДЫ

В настоящей работе выполнено моделирование атомистической динамики расплава лития при температуре $T = 475$ К ($T_m = 453.65$ К) с различными модельными потенциалами межчастичного взаимодействия: сферическим псевдопотенциалом [12], ЕАМ-потенциалом [15] и МЕАМ-потенциалом [16]. Показано, что парный псевдопотенциал [12] и потенциал погруженного атома (ЕАМ-потенциал) [15] достаточно верно воспроизводят «структурные» особенности расплава лития вблизи температуры плавления и довольно хорошо описывают экспериментальные данные по дифракции рентгеновских лучей [21], в то время как результаты моделирования с МЕАМ-потенциалом [16] имеют существенные расхождения с экспериментом. Обнаружено, что сферический псевдопотенциал наиболее качественно воспроизводит экспериментальные данные по рассеянию рентгеновских лучей для широкой области значений волновых чисел, а также дисперсию коллективных возбуждений

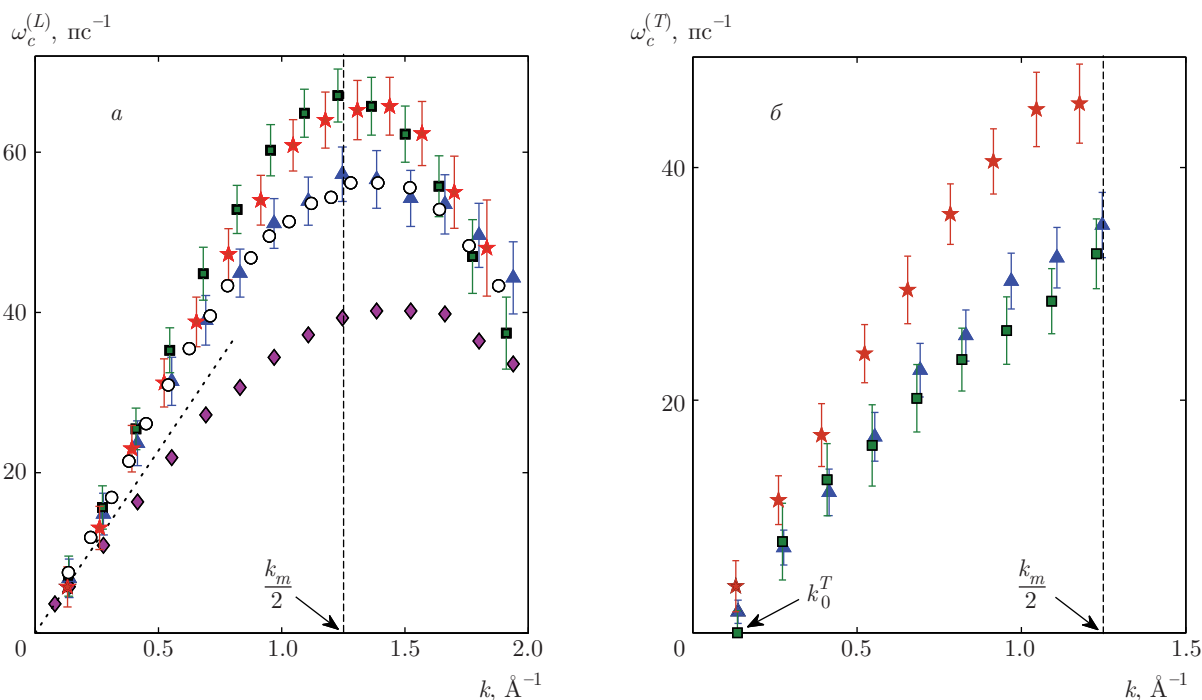


Рис. 4. (В цвете онлайн) *а*) Дисперсия коллективных возбуждений продольной поляризации для расплава лития при температуре $T = 475$ К. \blacktriangle , \blacksquare и \star — результаты моделирования соответственно с эффективным сферическим псевдопотенциалом [12], EAM-потенциалом [15] и модифицированным (MEAM) потенциалом погруженного атома [16]; \circ — экспериментальные данные по неупругому рассеянию рентгеновских лучей [23]; значки \blacklozenge соответствуют частоте $\omega_0(k) = \sqrt{k_B T k^2 / [m S(k)]}$ [21]. Пунктирная линия соотносится с $\omega_c^{(L)}(k) = c_s k$, где $c_s = 4554$ м/с — адиабатическая скорость распространения звука. *б*) Закон дисперсии коллективных возбуждений поперечной поляризации для жидкого лития. Штриховыми линиями отмечены границы первой псевдозоны Бриллюэна

продольной поляризации в жидком литии. Данный результат является весьма неожиданным, поскольку указывает на то, что потенциал сферического типа способен воспроизводить ион-ионное взаимодействие расплава лития. Установлено наличие распространяющихся коллективных возбуждений поперечной поляризации в расплаве лития вблизи температуры плавления.

Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета и суперкомпьютере Межведомственного Суперкомпьютерного центра Российской академии наук. Авторы благодарны проф. Л. Э. Гонзалесу (L. E. González, Universidad de Valladolid, Valladolid, Spain) за предоставленную информацию (параметры, характеристики) о псевдопотенциале жидкого лития. Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Министерством образования и науки РФ Казанскому федеральному университету для выполнения государ-

ственного задания в сфере научной деятельности (No. 3.2166.2017/4.6). Кроме того, работа поддержана грантом Президента РФ (молодые доктора наук) МД-5792.2016.2.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Потенциалы межатомного взаимодействия

Сферический эффективный псевдопотенциал [12] определяется суммой кулоновского взаимодействия между ионами и электронно-опосредованным вкладом:

$$U(r) = \frac{Z^2}{r} + \phi(r), \tag{10}$$

где Z — зарядовое число. В свою очередь, фурье-образ $\phi(k) = FT[\phi(r)]$ связан с псевдопотенциалом $v(k)$ и функцией отклика электронного газа

$$\chi(k) = \frac{\chi^{(0)}(k)}{1 - \frac{4\pi}{k^2} [1 - G(k)] \chi^{(0)}(k)} \tag{11}$$

Таблица. Некоторые параметры ЕАМ-потенциала

n	$\bar{\rho}_n$	$a_n, \text{эВ}$	$b_n, \text{эВ}$	$c_n, \text{эВ}$	$g_n, \text{эВ} \cdot \text{Å}^n$	d_n
0	1.0	—	—	—	−1.615	—
1	0.9	−0.895	—	0.0326	32.92	0.253 эВ
2	0.84	−0.894	−0.00652	1.7	−245.83	0.153 эВ/Å
3	0.70	−0.888	−0.21052	−1.02	840.22	2.450 Å
4	0.55	−0.878	0.07508	1.75	−1369.38	0.380 эВ
5	0.35	−0.850	−0.44992	−1.0	905.62	1.960 Å ^{−1}
6	1.10	−0.800	−0.04992	11.0	—	—
7	—	−0.894	0.00652	0.0	—	—

следующим образом:

$$\phi(k) = \chi(k)|v(k)|^2. \tag{12}$$

Здесь функция $G(k)$ учитывает эффекты обмена и корреляции между электронами.

Потенциал погруженного атома (многочастичный ЕАМ-потенциал) [15] определяется выражением

$$U = \sum_i \Phi(\bar{\rho}_i) + \sum_{i < j} \varphi(r_{ij}). \tag{13}$$

Здесь $\varphi(r)$ — парный потенциал межатомного взаимодействия, $\Phi(\bar{\rho}_i)$ — «потенциал погружения» i -го атома, зависящий от эффективной электронной плотности $\bar{\rho}$. Электронная плотность $\bar{\rho}_i$ для i -го атома определяется следующим образом [29]:

$$\bar{\rho}_i = \sum_j \varrho(r_{ij}), \tag{14}$$

где

$$\begin{aligned} \varrho(r) &= p_1 \exp(-p_2 r), \\ p_1 &= 3.0511, \\ p_2 &= 1.22 \text{ Å}^{-1}. \end{aligned} \tag{15}$$

Далее, потенциал погружения $\Phi(\bar{\rho})$ определяется через выражения, соответствующие конкретным значениям величины $\bar{\rho}$:

$$\Phi(\bar{\rho}) = \begin{cases} a_1 + c_1(\bar{\rho} - \bar{\rho}_0)^2, & \bar{\rho}_1 < \bar{\rho} < \bar{\rho}_6, \\ a_i + b_i(\bar{\rho} - \bar{\rho}_{i-1}) + c_i(\bar{\rho} - \bar{\rho}_{i-1})^2, & \bar{\rho}_i < \bar{\rho} < \bar{\rho}_{i-1} \quad (i = 2, 3, 4, 5), \\ a_6 + b_6(\bar{\rho} - \bar{\rho}_5) + c_6(\bar{\rho} - \bar{\rho}_5)^2, & \bar{\rho} < \bar{\rho}_5, \\ a_7 + b_7(\bar{\rho} - \bar{\rho}_6) + c_7(\bar{\rho} - \bar{\rho}_6)^{3/2}, & \bar{\rho} \geq \bar{\rho}_6. \end{cases} \tag{16}$$

Параметры, необходимые для данной процедуры, представлены в таблице.

И, наконец, парное взаимодействие задается следующим образом:

$$\varphi(r) = \begin{cases} d_1 + d_2(d_3 - r) + d_4 (\exp[d_5(d_3 - r)] - 1), & r \leq 2.45 \text{ Å}, \\ g_0 + \frac{g_1}{r} + \frac{g_2}{r^2} + \frac{g_3}{r^3} + \frac{g_4}{r^4} + \frac{g_5}{r^5}, & r > 2.45 \text{ Å}. \end{cases} \tag{17}$$

Значения параметров потенциала приведены в таблице.

Модифицированный потенциал погруженного атома (МЕАМ-потенциал) [16]) в отличие от ЕАМ-потенциала также содержит в многочастичной функции — а именно, в потенциале погружения — вклад, учитывающий трехчастичные взаимодействия. Данный потенциал был предложен для описания 23 различных элементов, основное состояние которых характеризуется различными кристаллическими решетками (ГЦК, ОЦК и алмазной кубической). МЕАМ-потенциал задается общим выражением:

$$U = \sum_i \left[\Phi_i(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{j(\neq i)} \varphi_{ij}(r_{ij}) \right]. \tag{18}$$

Здесь эффективная электронная плотность $\bar{\rho}$ есть

$$\bar{\rho} = \rho^{(0)} \sqrt{1 + \sum_{l=1}^3 t^{(l)} \left(\frac{\rho^{(l)}}{\rho^{(0)}} \right)^2}, \tag{19}$$

где

$$\rho^{(l)} = \sqrt{\sum_i \sum_k \rho_l(r_{ik}) \sum_j \rho_l(r_{kj}) P_l^0(\cos(\theta_{ijk}))}, \quad (20)$$

$$\rho_l(r) = \exp[-\beta^{(l)}(r/r_0 - 1)], \quad (21)$$

$r_0 = 3.04 \text{ \AA}$ — расстояние между соседними атомами, $P_l^0(\cos \theta)$ — присоединенные многочлены Лежандра, $t^{(l)}$ и $\beta^{(l)}$ — весовые факторы и коэффициенты затухания для парциальных электронных плотностей, которые принимают следующие значения: $t^{(1)} = 0.26$, $t^{(2)} = 0.44$, $t^{(3)} = -0.20$ и $\beta^{(0)} = 1.43$, $\beta^{(1)} = 1.0$, $\beta^{(2)} = 1.0$, $\beta^{(3)} = 1.0$.

Вклад, связанный с потенциалом погружения, задается в виде

$$\Phi(\bar{\rho}) = AE_c \bar{\rho} \ln \bar{\rho}, \quad (22)$$

где $A = 0.87$ — масштабирующий фактор для энергии «погружения» и $E_c = 1.65 \text{ эВ}$ — энергия сублимации.

И, наконец, вклад, связанный с парным потенциалом, определяется через соотношение

$$\varphi(r) = \frac{2}{Z} [E^u(r) - \Phi(\bar{\rho}(r))], \quad (23)$$

где учитывается энергия атома соответствующей эталонной структуры

$$E^u(r) = -E_c [1 + \alpha(r/r_0 - 1)] \exp[-\alpha(r/r_0 - 1)], \quad (24)$$

$\alpha = 2.97$ — константа затухания энергии $E^u(r)$.

ЛИТЕРАТУРА

1. N. H. March, *Liquid Metals: Concepts and Theory*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1990).
2. А. В. Мокшин, Р. М. Хуснутдинов, А. Р. Ахмерова, А. Р. Мусабинова, Письма в ЖЭТФ **106**, 343 (2017).
3. W.-C. Pilgrim and Chr. Morkel, *J. Phys: Condens. Matter* **18**, R585 (2006).
4. N. W. Ashcroft, *Phys. Lett.* **23**, 48 (1966).
5. *Handbook of Thermodynamic and Transport Properties of Alkali Metals*, Blackwell Scientific, Oxford (1991).
6. N. M. Blagoveshchenskii, V. A. Morozov, A. G. Novikov, M. A. Pashnev, V. V. Savostin, A. L. Shimkevich, and O. V. Sobolev, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 104201 (2008).
7. A. Fraile, S. Cuesta-López, R. Iglesias, A. Caro, and J. M. Perlado, *J. Nucl. Mater.* **440**, 98 (2013).
8. K. Hoshino and W. H. Young, *J. Phys. F* **16**, 1659 (1986).
9. T. Das and R. N. Joarder, *J. Non-Cryst. Sol.* **117**, 583 (1990).
10. W. Jank and J. Hafner, *J. Phys.: Codens. Matter* **2**, 5065 (1990).
11. A. B. Walker and R. Taylor, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 9481 (1990).
12. L. E. González, D. J. González, M. Silbert, and J. A. Alonso, *J. Phys.: Condens. Matter* **5**, 4283 (1993).
13. L. E. González, D. J. González, and J. M. López, *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, 7801 (2001).
14. Д. К. Белашенко, О. И. Островский, ТВТ **47**, 231 (2009).
15. D. K. Belashchenko, *Inorg. Mater.* **48**, 79 (2012).
16. M. I. Baskes, *Phys. Rev. B* **46**, 2727 (1992).
17. T. Scopigno, G. Ruocco, and F. Sette, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 881 (2005).
18. А. В. Мокшин, Р. М. Юльметьев, Р. М. Хуснутдинов, П. Хангги, ЖЭТФ **130**, 974 (2006).
19. J. P. Hansen and I. R. McDonald, *Theory of Simple Liquids*, Acad. Press, New York (2006).
20. Р. М. Хуснутдинов, А. В. Мокшин, Б. А. Клумов, Р. Е. Рыльцев, Н. М. Щелкачев, ЖЭТФ **150**, 306 (2016).
21. Y. Waseda, *The Structure of Non-Crystalline Materials: Liquids and Amorphous Solids*, McGraw-Hill, New York (1980).
22. А. В. Мокшин, Р. М. Хуснутдинов, А. Г. Новиков, Н. М. Благовещенский, А. В. Пучков, ЖЭТФ **148**, 947 (2015).
23. T. Scopigno, U. Balucani, G. Ruocco, and F. Sette, *J. Phys.: Condens. Matter* **12**, 8009 (2000).
24. W. Montfrooij and I. de Schepper, *Excitations in Simple Liquids, Liquid Metals and Superfluids*, Oxford Univ. Press, New York (2010).
25. Р. М. Хуснутдинов, А. В. Мокшин, Письма в ЖЭТФ **100**, 42 (2014).
26. J. P. Boon and S. Yip, *Molecular Hydrodynamics*, McGraw-Hill, New York (1980).
27. Р. М. Хуснутдинов, А. В. Мокшин, С. Г. Меньшикова, А. Л. Бельтюков, В. И. Ладьянов, ЖЭТФ **149**, 994 (2016).
28. C. Yang, M. T. Dove, V. V. Brazhkin, and K. Trachenko, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 215502 (2017).
29. А. В. Мокшин, А. В. Чванова, Р. М. Хуснутдинов, ТМФ **171**, 135 (2012).