

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАТРИЯ В МОДЕЛИ
ПОГРУЖЕННОГО АТОМА© 2021 г. Д. К. Белашенко^{а,*}^аНациональный исследовательский технологический университет “Московский институт стали и сплавов”,
Москва, Россия

*e-mail: dkbel75@gmail.com

Поступила в редакцию 04.01.2020 г.

После доработки 16.02.2020 г.

Принята к публикации 10.06.2020 г.

Уточнен парный вклад в потенциал ЕАМ натрия. По данным об ударном сжатии и изотермическом сжатии при 298 К натрия рассчитаны два потенциала ЕАМ-2 и ЕАМ-3, отличающиеся формой потенциалов погружения. Рассчитаны основные термодинамические, структурные, вязкие и диффузионные свойства моделей в двух вариантах. Потенциал ЕАМ-2 недостаточно хорошо описывает свойства натрия при 298 К, а потенциал ЕАМ-3 неточен при описании свойств в условиях ударного сжатия. Это означает, что фиксированный потенциал ЕАМ не справляется с описанием зависимости свойств металла от температуры. При 900 К давление моделей с потенциалом ЕАМ-3 близко к данным метода *ab initio*. Предпик парной корреляционной функции натрия не виден, но аномальное поведение давления ОЦК натрия вблизи ~19–25 ГПа подтверждено. Рассчитаны линии плавления моделей натрия в двух вариантах, с максимумом около 30 ГПа. Обсуждается проблема предсказательной силы модели погруженного атома.

DOI: 10.31857/S0044453721010040

ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе межчастичное взаимодействие в натрии описывается потенциалом модели погруженного атома (Embedded atom model – ЕАМ), в которой потенциальная энергия имеет вид [1]:

$$U = \sum_i \Phi(\rho_i) + \sum_{i<j} \varphi(r_{ij}), \quad (1)$$

где $\Phi(\rho_i)$ – потенциал погружения i -го атома, зависящий от “эффективной электронной плотности” ρ в месте нахождения центра атома, а вторая сумма по парам атомов содержит обычный парный потенциал. Эффективная электронная плотность в точке нахождения атома создается окружающими атомами и определяется по формуле:

$$\rho_i = \sum_j \psi(r_{ij}), \quad (2)$$

где r_{ij} – расстояние между частицами i и j , а $\psi(r_{ij})$ – вклад в электронную плотность от соседа номер j . Межчастичная сила для пары i – j равна:

$$f(r_{ij}) = - \left[\frac{d\Phi(\rho)}{d\rho} \Big|_i + \frac{d\Phi(\rho)}{d\rho} \Big|_j \right] \times \quad (3)$$

$$\times d\psi/dr_{ij} - d\varphi/dr_{ij}.$$

В расчетах используются три подгоночные функции $\Phi(\rho)$, $\varphi(r)$ и $\psi(r)$, так что возможности согла-

сования расчетных свойств с экспериментальными значениями очень широки.

Потенциалы ЕАМ для моделирования натрия методом молекулярной динамики (МД) [2] были ранее предложены в [3–11]. Кроме того, модели натрия были исследованы методом *ab initio* [12–17]. В [3, 4] парный вклад в потенциал ЕАМ был рассчитан алгоритмом Шоммерса [18, 19] и оказался достаточно точным для построения моделей натрия вдоль бинодали [3–6, 9, 10]. В [5] этот вариант потенциала (ниже упоминается как ЕАМ-1) был использован для расчетов целого ряда свойств жидкого натрия. Однако форма потенциала на расстояниях вблизи минимального межчастичного расстояния $r_{\min} = 2.90 \text{ \AA}$ оказалась неудачной из-за наличия участка с отрицательной 2-й производной, в связи с чем при высоких давлениях появлялся предпик парной корреляционной функции (ПКФ) модели. Кроме того, не удавалось получить правильную форму линии плавления моделей. В [17] предпик ПКФ моделей при высоких давлениях методом *ab initio* обнаружен не был. В настоящей работе эти недостатки парного вклада в потенциал ЕАМ устранены.

Вторая и, пожалуй, основная цель работы – оценить предсказательную силу модели погруженного атома (ЕАМ).

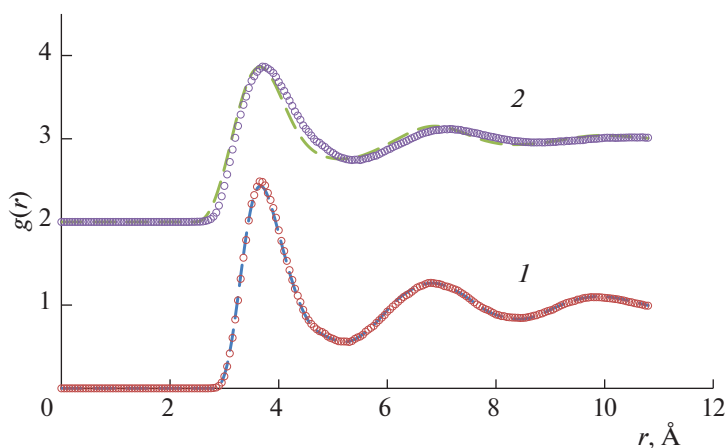


Рис. 1. Парные корреляционные функции жидкого натрия; 1 – 378 К, плотность 0.924 г/см^3 , невязка $R_g = 0.016$ (с потенциалом по Шоммерсу), 2 – 823 К, плотность 0.825 г/см^3 , невязка $R_g = 0.071$. Штриховые линии – дифракционные данные [20], маркеры – метод МД с потенциалом ЕАМ-2.

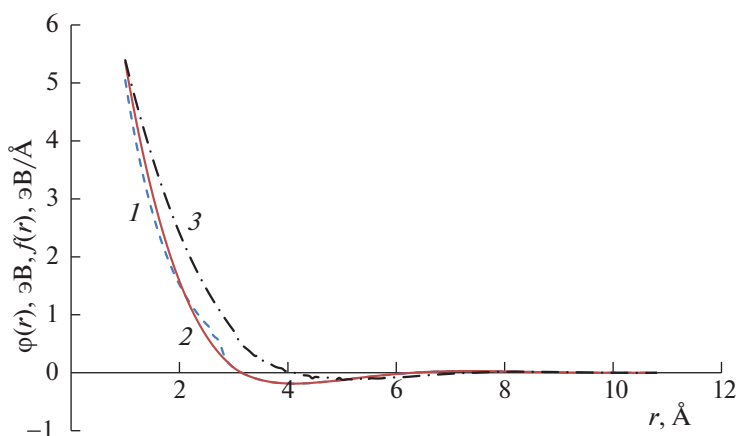


Рис. 2. Парные вклады $\phi(r)$ в потенциал ЕАМ; 1 – $\phi(r)$ из [3–5], 2 – $\phi(r)$, настоящая работа, 3 – силовая функция $f(r) = -d\phi(r)/dr$, настоящая работа.

Парный вклад в потенциал ЕАМ жидкого натрия. Парный вклад $\phi(r)$ выбрали в кусочно-непрерывной форме [3, 4]. Исходным пунктом было построение модели жидкого натрия при 378 К методом молекулярной динамики (МД) [3, 6] (алгоритм Верле) по дифракционным данным. Некоторые дифракционные ПКФ жидкого натрия приведены на рис. 1 [20]. Компьютерные модели содержали 2000 атомов в основном кубе. Радиус r_c обрыва парного вклада в межчастичное взаимодействие равнялся 10.78 Å (середина правого склона 3-го пика ПКФ). Шаг по времени составлял $\Delta t = 0.01t_0$, где $t_0 = 4.881 \times 10^{-14} \text{ с}$ – внутренняя единица времени (при температуре $T \geq 10\,000 \text{ К}$, $\Delta t = 0.005t_0$). С помощью алгоритма Шоммерса методом МД была построена модель при 378 К с фактической плотностью (0.9239 г/см^3), с низким давлением ($\sim 2.0 \times 10^{-2} \text{ ГПа}$) и очень малой невязкой (стандартным отклонением) между дифракционной и модельной ПКФ, $R_g = 0.016$. В работе

[3] в процедуре Шоммерса была использована ПКФ [20] при $r \geq 2.55 \text{ Å}$. В результате парный вклад в потенциал ЕАМ содержал интервал с отрицательной кривизной потенциала при $2.1 < r < 2.85 \text{ Å}$ (рис. 2, линия 1). В настоящей работе этот интервал был исключен, как искаженный ложными осцилляциями, и значения потенциала Шоммерса были определены для расстояний $r \geq r_{\min} = 2.90 \text{ Å}$, при которых дифракционная ПКФ известна достаточно надежно. Исключение этого интервала привело к исчезновению предпика ПКФ при высоких давлениях (см. ниже).

Алгоритм Шоммерса позволяет получить ПКФ в виде таблицы значений. При аппроксимации данных этой таблицы ось расстояний была разбита на интервалы с точками делений r_i ($i = 1, 2, \dots, 10$) = 2.80, 2.95, 3.45, 3.95, 4.45, 4.95, 5.45, 5.95, 7.45 и 10.78 Å . Первый интервал ограничен точками $r = 0$ и $r = r_1$, второй – точками $r = r_1$ и $r = r_2$ и т.д. Аналогично работам [3, 4], парный потенциал

Таблица 1. Коэффициенты d_{im} разложения парного потенциала $\varphi(r)$ натрия в ряд (4) по степеням $(r - r_i)$, i – номер интервала

i	$r_{i-1} - r_i, \text{ \AA}$	d_{i0}	d_{i1}	d_{i2}	d_{i3}	d_{i4}	b_{i5}	d_{i6}
2	2.80–2.95	0.12708218	–0.78856218	1.4613397	–23.646932	–	–	–
3	2.95–3.45	–0.11093583	–0.30139562	–0.57444694	–7.6710592	–29.513198	–53.353203	–35.242442
4	3.45–3.95	–0.18380286	–0.031204076	0.66662912	4.8636249	20.310489	37.538781	25.743498
5	3.95–4.45	–0.17446597	0.094991311	0.61158912	3.8291921	12.551371	18.518679	10.122143
6	4.45–4.95	–0.13020295	0.087927282	–0.56735449	–5.2796190	–19.751878	–33.862967	–21.896864
7	4.95–5.45	–0.073686510	0.13220064	0.75321670	6.8207026	26.093839	45.498140	29.748444
8	5.45–5.95	–0.026368676	0.079378478	–0.076503428	–0.64246319	–3.6612803	–8.7641368	–7.2870333
9	5.95–7.45	0.028540069	–0.0019879458	0.0056904208	0.080223638	0.099188093	0.061698530	0.014612381
10	7.45–10.78	0.73629497	0	–0.40257317	–0.52993510	–0.16744300	–0.42268470	–0.65802071
		D-04		D-02	D-02	D-02	D-03	D-04

при $r \geq 2.90 \text{ \AA}$ был задан кусочно-непрерывной функцией:

$$\varphi(r), \text{ эВ} = \sum_{i=2}^n \sum_{m=0}^k d_{im} (r - r_i)^m H(r_{i-1}, r_i), \quad (4)$$

где i – номер интервала на оси расстояний, d_{im} – коэффициенты разложения в ряд, и функция Хевисайда $H(r_{i-1}, r_i)$ равна 1 в интервале $r_{i-1} \leq r \leq r_i$ и нулю в остальных интервалах. При всех $r = r_m$ непрерывен сам потенциал и его первая производная. В случае натрия выбрано $n = 10$, $k = 6$. Коэффициенты d_{im} получены в программе аппроксимации таблицы и приведены в табл. 1. Они совпадают с найденными в [3] для соответствующих интервалов. В этой процедуре значения потенциала были надежно определены для расстояний $r > 2.90 \text{ \AA}$, которые реально встречались в модели натрия при 378 К.

При $r_{\min} = 2.90 \text{ \AA}$ значение $\varphi(r_{\min}) = 0.173119 \text{ эВ}$ и силовая функция $f(r_{\min}) = -d\varphi(r)/dr = 0.85500 \text{ эВ/\AA}$. Поскольку при высоких температурах и давлениях минимальные межатомные расстояния становятся меньше, то необходима экстраполяция потенциала на меньшие расстояния. Поведение межчастичных сил в области $r < r_{\min}$ можно в принципе проанализировать по данным расчетов *ab initio*. Анализ показал, что эта область потенциала существенно влияет на форму линии плавления моделей, так что по экспериментальным данным о линии плавления натрия [21, 22] можно оценить вид парного вклада в потенциал. Силовая функция $f(r)$ в настоящей работе была гладко продолжена в область расстояний $r \leq 2.90 \text{ \AA}$ по формуле:

$$f(r) = -d\varphi(r)/dr = 0.85500 + 1.32876(r_{\min} - r) + a_{\text{pot}}(r_{\min} - r)^b. \quad (5)$$

В итоге удалось рассчитать эмпирически оптимальные коэффициенты $a_{\text{pot}} = 0.460$ и $b = 2.30$. Соответственно сам парный вклад в потенциал при $r \leq 2.90 \text{ \AA}$ описывается формулой:

$$\varphi(r), \text{ эВ} = \varphi(r_{\min}) + f(r_{\min})(r_{\min} - r) + 1.32876(r_{\min} - r)^2/2 + a_{\text{pot}}(r_{\min} - r)^{b+1}/(b+1), \quad (6)$$

где r выражено в \AA . Полученный при этом эффективный парный потенциал $\varphi(r)$ и его силовая функция $f(r) = -d\varphi(r)/dr$ показаны на рис. 2, линии 2 и 3. Он отличается от предложенного в [3, 4, 6] отсутствием участка вблизи 2.90 \AA с отрицательной второй производной $d^2\varphi(r)/dr^2$. На рис. 1 приведены ПКФ моделей жидкого натрия с реальной плотностью при 378 и 823 К в сравнении с дифракционными данными. Согласие модельных ПКФ с опытом неплохое, особенно при 378 К (стандартное отклонение между двумя функциями, или невязка, $R_g = 0.023$).

Эффективная электронная плотность. Эффективную электронную плотность ЕАМ выбрали в форме:

$$\psi(r) = p_1 \exp(-p_2 r).$$

Такая форма обеспечивает достаточно высокую чувствительность средней эффективной плотности электронов на атомах $\langle \rho \rangle$ к изменениям плотности натрия при нагревании. Значения p_1 и p_2 приведены в табл. 2. Они совпадают с принятыми в [3]. При таких значениях параметров эффективная электронная плотность $\rho_i = \sum_j \psi(r_{ij})$ на атомах модели жидкого натрия при 378 К и давлении $p \approx 0$ близка к единице (1.0007 ± 0.0761).

Энергия и давление электронов. Учитывая, что натрий хорошо описывается моделью свободных электронов (МСЭ), тепловую энергию электронов можно рассчитать с помощью двух уравнений

Таблица 2. Параметры потенциала погружения ЕАМ-2 натрия

Параметр	Значение	Параметр	Значение, эВ	Параметр	Значение, эВ	Параметр	Значение, эВ
1	2	3	4	5	6	7	8
ρ_1	0.90	a_1	-0.331400	b_1	-	c_1	0.1619
ρ_2	0.80	a_2	-0.329781	b_2	-0.032380	c_2	-0.170
ρ_3	0.70	a_3	-0.328243	b_3	0.001620	c_3	-0.335
ρ_4	0.62	a_4	-0.331755	b_4	0.068620	c_4	0.600
ρ_5	0.28	a_5	-0.333405	b_5	-0.027380	c_5	0.880
ρ_6	1.40	a_6	-0.222367	b_6	-0.625780	c_6	5.000
ρ_7	2.48	a_7	-0.305496	b_7	0.129520	c_7	-0.058
m	1.20	a_8	-0.229226	b_8	0.058840	c_8	0.168
n	1.70	p_1	3.4418	p_2	1.0245	r_c	10.78 Å

Таблица 3. Значения электронных вкладов в энергию натрия, E_{eT} , кДж/моль; $Z = V_0/V$, $V_0 = 23.74 \text{ см}^3/\text{моль}$

$T, \text{ К}$	Z											
	0.8	0.9	1	1.1	1.3	1.5	1.7	1.9	2.1	2.3	2.5	2.7
	E_{eT}											
298	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
500	0.105	0.097	0.091	0.085	0.076	0.069	0.064	0.059	0.055	0.052	0.049	0.047
700	0.261	0.242	0.225	0.211	0.189	0.172	0.158	0.147	0.137	0.129	0.122	0.116
1000	0.593	0.548	0.511	0.480	0.429	0.390	0.359	0.333	0.312	0.294	0.278	0.264
2000	2.533	2.344	2.187	2.053	1.838	1.672	1.539	1.429	1.337	1.259	1.191	1.132
3000	5.724	5.304	4.952	4.654	4.171	3.797	3.496	3.249	3.040	2.863	2.709	2.574
5000	15.517	14.452	13.547	12.768	11.493	10.491	9.679	9.007	8.440	7.953	7.531	7.161
10000	53.891	51.080	48.590	46.367	42.559	39.410	36.758	34.492	32.531	30.817	29.304	27.958
15000	102.61	98.482	94.738	91.324	85.305	80.150	75.674	71.743	68.258	65.145	62.344	59.810
20000	156.10	151.02	146.36	142.05	134.34	127.59	121.61	116.27	111.45	107.08	103.10	99.45
25000	201.00	196.02	186.99	178.98	171.81	165.31	159.40	153.97	148.97	144.35	201.00	196.02

статистической механики, определяющих число коллективизированных электронов и их энергию:

$$N_{el} = C \int_0^{\infty} \frac{\epsilon^{1/2} d\epsilon}{1 + \epsilon^{(\epsilon-\mu)/kT}}, \quad E_{el} = C \int_0^{\infty} \frac{\epsilon^{3/2} d\epsilon}{1 + \epsilon^{(\epsilon-\mu)/kT}}. \quad (7)$$

В этих уравнениях величина N_{el} – число электронов, μ – химический потенциал электронов. В модели свободных электронов коэффициент $C = 4\pi(2m)^{3/2}V/h^3$, где m – масса электрона, V – объем металла и h – постоянная Планка. Эти уравнения обычно хорошо выполняются для простых жидких металлов, структура которых изотропна. Задав N_{el} , объем V и температуру T , можно найти из первого уравнения величину μ , а потом из второго уравнения – энергию электронов E_{el} . Величину электронного давления p_{el} можно рассчитать по формуле [23]:

$$p_{el}V = (2/3)E_{el}, \quad (8)$$

где V – объем. Изменение тепловой энергии электронов при нагревании можно определить, как

$E_{eT}(T) = E_{el}(T) - E_{el}(298 \text{ К})$. Значения $E_{eT}(T)$ натрия в МСЭ приведены в табл. 3. Как и в случае электронной энергии, изменение теплового давления электронов определим, как $p_{eT}(T) = p_{el}(T) - p_{el}(298 \text{ К})$. Электронные энергию и давление следует добавить к свойствам моделей.

Потенциал погружения. Потенциал погружения выбрали в следующей кусочно-непрерывной форме:

$$\begin{aligned} \Phi(\rho), \text{ эВ} = & [a_1 + c_1(\rho - 1)^2]H_{12}(\rho, \rho_1, \rho_6) + \\ & + [a_2 + b_2(\rho - \rho_1) + c_2(\rho - \rho_1)^2]H_{12}(\rho, \rho_2, \rho_1) + \\ & + [a_3 + b_3(\rho - \rho_2) + c_3(\rho - \rho_2)^2]H_{12}(\rho, \rho_3, \rho_2) + \\ & + [a_4 + b_4(\rho - \rho_3) + c_4(\rho - \rho_3)^2]H_{12}(\rho, \rho_4, \rho_3) + \\ & + [a_5 + b_5(\rho - \rho_4) + c_5(\rho - \rho_4)^2]H_{12}(\rho, \rho_5, \rho_4) + \\ & + [a_6 + b_6(\rho - \rho_5) + c_6(\rho - \rho_5)^2] \times \\ & \times [2\rho/\rho_5 - (\rho/\rho_5)^2]H_{12}(\rho, 0, \rho_5) \end{aligned} \quad (9)$$

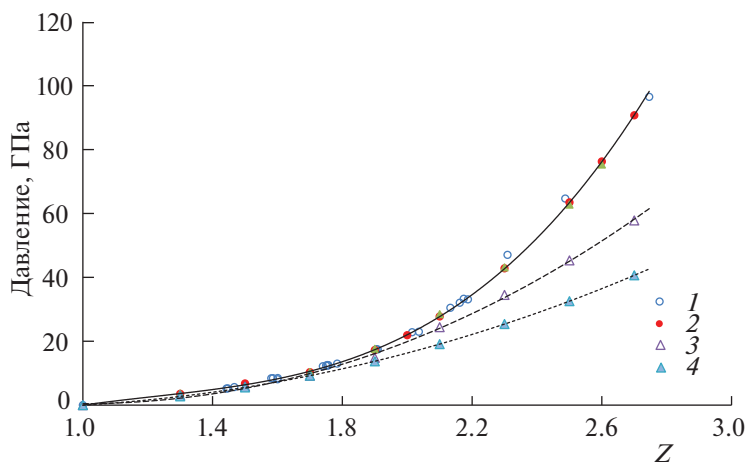


Рис. 3. Ударная адиабата и холодное давление натрия; 1 – данные [26, 27], 2 – метод МД с потенциалом ЕАМ-2, 3 – давление при 298 К с потенциалом ЕАМ-2, 4 – статические данные при 298 К [28].

$$+ [a_7 + b_7(\rho - \rho_6) + c_7(\rho - \rho_6)^m]H_{12}(\rho, \rho_6, \rho_7) + \\ + [a_8 + b_8(\rho - \rho_7) + c_8(\rho - \rho_7)^n]H_{12}(\rho, \rho_7, \infty).$$

Здесь $H_{12}(z, a, b) = 1$ при $a \leq z \leq b$ и $H_{12}(z) = 0$ в остальных случаях. Очень полезная особенность такого выбора функции заключается в том, что производная $d\Phi(\rho)/d\rho$ обращается в нуль при $\rho = 1$, так что при условии $\langle \rho \rangle = 1$ движением атомов управляет только парный потенциал $\Phi(r)$ (согласно (4)).

Подбор части параметров потенциала погружения был проведен по свойствам жидкого натрия на бинадали при 378–2300 К. Коэффициент a_1 определяется по энергии атомизации. Ранее параметры потенциала погружения были рассчитаны в [6] с учетом данных по ударному сжатию натрия. При выборе значения $a_1 = -0.3314$, температуре 298 К и плотности ОЦК натрия 0.968 г/см^3 давление модели очень мало (-0.05 ГПа), а энергия модели составляет $E_{298} = U_{298} + (3/2)R \times 298 = -99.98 \text{ кДж/моль}$ (R – универсальная газовая постоянная), что очень близко к фактическому значению $E_{298}^0 = -101.3 \text{ кДж/моль}$ [24]. Коэффициент c_1 находили по модулю всестороннего сжатия K_T при 378 К. Значения коэффициентов c_i при $i < 7$ выбирались с учетом зависимости плотности жидкого натрия на бинадали от температуры [25]. Остальные параметры (a_i и b_i) определяются из условий непрерывности функций $\Phi(\rho)$ и $d\Phi/d\rho$ при $\rho = \rho_i$.

Ниже рассчитаны два потенциала погружения натрия – по форме ударной адиабаты (ЕАМ-2) и по форме изотермы давления при 298 К (ЕАМ-3).

Потенциал ЕАМ-2. Для расчета параметров ρ_6 , ρ_7 , c_7 , c_8 , m , n потенциала погружения в первом варианте (ЕАМ-2) мы использовали результаты ударного сжатия компактного натрия при давлени-

ниях до 96 ГПа, опубликованные в [26, 27]. Ударная адиабата, построенная по этим данным, показана на рис. 3. Она хорошо аппроксимируется выражением:

$$p, \text{ ГПа} = 1.8754\text{E}+01Z^3 - 6.2863\text{E}+01Z^2 + \\ + 7.9595\text{E}+01Z - 3.5132\text{E}+01, \quad (10)$$

где p – давление, $Z = V_0/V$, V – мольный объем, и $V_0 = 23.74 \text{ см}^3/\text{моль}$. Энергия на адиабате E рассчитывается по уравнению [29]:

$$E - E_0 = 0.5(p + p_0)(V_0 - V), \quad (11)$$

где V_0 , p_0 и E_0 – исходные объем, давление и энергия. Подбор параметров m , n , c_7 и c_8 в (9) проводили с учетом тепловой энергии и давления электронов таким образом, чтобы получить совпадающие с фактическими значения давления и энергии МД модели на адиабате Гюгоньо. Методика расчета описана, например, в [5, 30]. Найденные подгонкой значения параметров потенциала погружения ЕАМ-2 приведены в табл. 2. Они несколько отличаются от предложенных в [3, 5, 6]. Потенциал погружения ЕАМ-2 показан на рис. 4.

Свойства натрия на бинадали. Результаты расчетов свойств моделей натрия на бинадали методом МД с потенциалом ЕАМ-2 приведены в табл. 4. При температурах до 2300 К получено хорошее согласие с опытом для плотности и энергии моделей, а также для ПКФ моделей и дифракционных ПКФ при температурах до 700 К (низкие значения невязок R_g). В целом эти результаты мало отличаются от полученных в [3, 4], кроме данных по энергии натрия при высоких температурах. Уточненные данные по энергии моделей с учетом электронных вкладов хорошо согласуются с экспериментом [25]. В табл. 5 приведены значения теплоемкости C_p в сравнении с данными опыта [31].

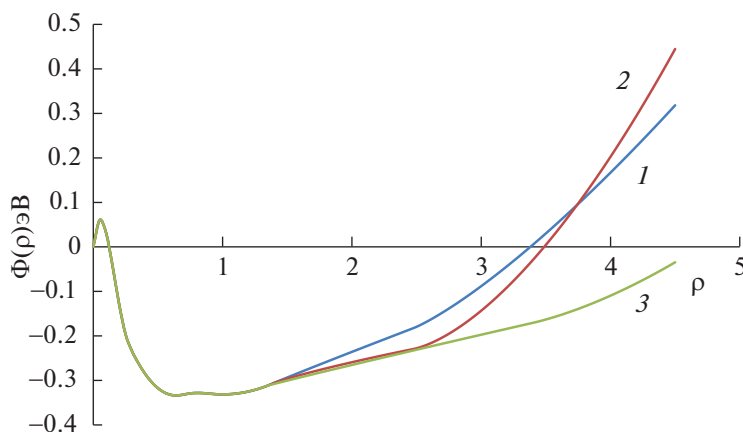


Рис. 4. Потенциал погружения натрия; 1 – работа [6], 2 – ЕАМ-2, 3 – ЕАМ-3.

Они согласуются при температурах до ~1500 К, а при более высоких температурах теплоемкость моделей немного занижена. Модуль всестороннего сжатия в общем близок к экспериментальным данным [25] при температурах до 1500 К. При более высоких температурах точность расчета модуля становится довольно низкой из-за возрастания флуктуаций давления модели.

В табл. 6 приведены значения коэффициентов самодиффузии моделей натрия на бинадали. Здесь также видно согласие с опытными данными [32] и МД расчетами [11], где применен тот же потенциал ЕАМ, что и в [3]. Эта зависимость хорошо описывается формулой $D \times 10^5, \text{ см}^2/\text{с} = 1.81 \times 10^{-4} T^{1.7283}$.

Сдвиговая вязкость η натрия была рассчитана методом МД вдоль бинадали при температурах до

1500 К через автокорреляционную функцию (АКФ) тензора давлений (формулы Кубо). Усреднение АКФ проводили по $\sim(1.5-2.0) \times 10^5$ МД прогонам. Плотность моделей равнялась реальной [25]. Интегрирование АКФ проводили на интервале 3600 шагов по времени. Результаты приведены ниже:

$T, \text{ К}$	378	600	823	1000	1500
$\eta, \text{ мПа с, МД}$	0.517	0.278	0.212	0.170	0.123
$\eta, \text{ мПа с [25]}$	0.667	0.321	0.221	0.181	0.128
$\eta, \text{ мПа с [11]}$	–	0.283*	0.221	0.200*	0.146

* интерполяция

Наши МД-результаты довольно близки к данным [11] и при $T < 800 \text{ К}$ несколько занижены по сравнению с опытом [25].

Таблица 4. Расчетные свойства натрия на бинадали, полученные методом МД с потенциалом ЕАМ-2

$T, \text{ К}$	$d, \text{ г/см}^3$ [25]	$p, \text{ ГПа}$				$\langle \rho \rangle^b$	R_g	$K_T, \text{ ГПа}$		$E, \text{ кДж/моль}$			
		ЕАМ	p_{eT}	ЕАМ + p_{eT}	Опыт [25]			ЕАМ	Опыт [25]	ЕАМ	E_{eT}	ЕАМ + E_{eT}	Опыт [24, 25]
298 ^a	0.968	-0.043	0	-0.043	~0	1.054	–	8.29	6.3	-99.88	0.000	-99.88	-101.30
378	0.9239	0.012	0.0008	0.013	~0	1.001	0.023	6.27	5.14	-95.28	0.031	-95.25	-96.00
473	0.9041	0.026	0.0022	0.028	~0	0.995	0.029	5.31	4.68	-92.47	0.079	-92.39	-93.03
573	0.8807	0.020	0.0036	0.024	~0	0.948	0.036	4.39	4.25	-89.77	0.142	-89.63	-89.00
723	0.8439	0.012	0.0065	0.018	~0	0.898	0.063	3.23	3.66	-85.62	0.266	-85.35	-85.53
823	0.8196	0.013	0.0088	0.022	~0	0.868	0.071	3.05	3.29	-82.88	0.368	-82.51	-82.63
1000	0.7778	0.001	0.0133	0.014	~0	0.817	–	2.61	2.70	-78.16	0.590	-77.57	-77.85
1200	0.7309	-0.008	0.0193	-0.006	~0	0.762	–	2.22	2.12	-72.56	0.912	-71.65	-71.71
1500	0.6561	0.007	0.0298	0.037	0.002	0.704	–	1.25	1.40	-64.13	1.565	-62.56	-62.56
2000	0.5097	0.020	0.0492	0.069	0.009	0.608	–	–	0.55	-49.36	3.330	-46.03	-44.83
2200	0.4312	0.030	0.057	0.087	0.013	0.564	–	–	0.29	-43.00	4.416	-38.58	-36.66
2300	0.3793	0.025	0.0586	0.084	–	0.544	–	–	0.17	-38.99	5.329	-33.66	-31.73

^a – ОЦК решетка,

^b – стандартное отклонение ρ растет сверху вниз от ± 0.056 до ± 0.178 .

Таблица 5. Теплоемкость C_p жидкого натрия вдоль бинодали, потенциал ЕАМ-2

T, K	C_p моделей, Дж/(моль К)	C_p натрия, Дж/(моль К) [31]
500	27.6	30.7
800	28.4	29.0
900	27.9	28.8
1100	29.6	29.0
1350	30.3	30.4
1750	33.1	35.4
2250	49.2	53.7

Таблица 6. Коэффициенты самодиффузии натрия, полученные методом МД с потенциалом ЕАМ-2

T, K	$D \times 10^5, \text{cm}^2/\text{c}$		
	ЕАМ-2	Опыт [32]	МД [11]
378	4.55	4.32 [32]	4.65
473	7.40	8.41 [32]	7.79
573	11.3	13.0 [32]	11.2
723	17.2	—	16.4
823	21.3	25.8 [34] (840 K)	19.7
1000	28.4	—	—
1200	38.5	—	33.6
1500	53.5	—	47.2
2000	87.2	—	—
2300	115.1	—	—

Свойства моделей натрия на ударной адиабате.

В табл. 7 приведены результаты расчетов свойств моделей натрия с потенциалом ЕАМ-2 при параметрах ударного сжатия. Эти параметры — температура и давление — находили так, чтобы давление и энергия модели при заданной степени сжатия $Z = V_0/V$ с учетом электронных вкладов как можно лучше совпадали с данными опыта [26, 27] (см. рис. 3). Согласие между данными опыта и МД расчета в целом хорошее. Среднее квадратичное отклонение между ними по энергии (колонки 4 и 12) равно всего 0.54 кДж/моль, а по давлению (колонки 2 и 11) 0.58 ГПа. Эти величины меньше обычной ошибки расчета параметров ударного сжатия.

Расчеты свойств моделей с потенциалом ЕАМ-2.

Используя потенциал ЕАМ-2, можно рассчитать методом МД энергию и давление моделей натрия с учетом тепловых вкладов электронов согласно МСЭ. Эти свойства приведены в табл. 8 и табл. 9 при температурах до 20000 К и степенях сжатия $Z \leq 2.7$. Зная эти свойства, можно рассчитать любые термодинамические свойства моделей натрия. В частности, можно рассчитать ударные адиабаты натрия при различных исходных пористостях образцов, как показано в [5, 33]. Результаты такого расчета для исходно компактного натрия показаны на рис. 3. Они хорошо согласуются с опытом.

В книге [5] были также рассчитаны таблицы термодинамических свойств натрия с применением потенциала ЕАМ-1 из [3, 6], отличающегося от принятого здесь. Очевидно, в состоянии на адиабате Гюгонио, общей для моделей в [3, 5, 6] и

Таблица 7. Свойства моделей натрия с потенциалом ЕАМ-2 при параметрах ударного сжатия

Z	$p, \text{ГПа}$ опыт (10)	$\Delta E, \text{кДж/моль}$ (11)	$E_{T^*}, \text{кДж/моль}$ Опыт	T, K моделей	T, K [35]	$p_{eT^*}, \text{ГПа}$ моделей	$E_{eT^*}, \text{кДж/моль}$	$p_{\text{МД}}, \text{ГПа}$ моделей	$E_{\text{МД}}, \text{кДж/моль}$	$p_{\text{МД}} + p_{eT^*}, \text{ГПа}$	$E_{\text{МД}} + E_{eT^*}, \text{кДж/моль}$
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1.0 ^a	0	0	-101.3	298	298	0.000	0.000	-0.052	-99.98	-0.05	-99.98
1.3 ^a	3.31	9.06	-92.24	395	500	0.001	0.027	3.19	-92.33	3.19	-92.30
1.5 ^a	6.11	24.20	-77.10	590	830	0.005	0.111	6.34	-77.45	6.34	-77.45
1.7	10.64	52.05	-49.25	940	1550	0.015	0.313	10.34	-49.68	10.36	-49.37
1.8	13.84	73.02	-28.28	1330	2110	0.033	0.637	13.18	-29.00	13.21	-28.36
1.9	17.80	100.1	-2.43	2125	2840	0.086	1.617	17.39	-2.61	17.48	-0.99
2.0	22.64	134.4	33.10	3080	3780	0.186	3.311	22.44	29.37	22.61	32.58
2.1	28.47	177.1	75.8	4420	4920	0.390	6.604	28.12	69.30	28.51	75.90
2.3	43.57	292.4	191.1	8290	7980 ^b	1.388	21.50	41.86	169.72	43.25	191.22
2.5	63.99	455.9	354.6	13980	—	3.850	54.82	59.46	300.26	63.31	355.08
2.6	76.48	558.9	457.6	17605	—	5.93	81.20	69.87	376.51	75.80	457.71
2.7	90.64	677.7	576.4	21805	—	8.73	115.15	81.72	462.07	90.45	577.22

^a Кристаллические состояния,^b Экстраполяция.

Таблица 8. Энергия моделей натрия с учетом электронных вкладов, кДж/моль. Потенциал ЕАМ-2

T, К	Z									
	1	1.1	1.3	1.5	1.7	1.9	2.1	2.3	2.5	2.7
298	-99.98	-99.85	-94.45	-85.07	-72.23	-56.38	-33.02	-3.83	28.81	64.11
500	-92.52	-94.52	-89.37	-79.82	-66.65	-50.68	-27.77	1.09	33.78	69.67
700	-87.18	-86.43	-83.28	-74.19	-60.76	-44.80	-22.26	6.29	39.02	75.31
1000	-80.02	-78.85	-72.10	-61.68	-47.77	-30.74	-7.89	20.28	52.64	88.75
2000	-56.57	-54.69	-46.90	-35.58	-21.50	-4.22	18.60	46.59	78.30	114.05
3000	-33.67	-31.48	-23.18	-11.43	2.86	20.05	42.88	70.52	102.06	137.39
5000	12.55	15.09	24.12	35.16	49.50	66.82	89.11	116.33	147.97	182.60
10000	133.6	135.9	143.2	153.9	166.7	183.6	205.2	231.0	261.6	295.1
15000	258.2	260.4	267.4	276.2	288.1	304.2	325.1	349.5	379.4	412.4
20000	385.4	386.6	392.6	401.4	412.9	428.2	447.3	472.1	501.0	533.0

Примечание. Ячейки с ОЦК-моделями закрашены.

Таблица 9. Давление моделей натрия с учетом электронных вкладов, ГПа. Потенциал ЕАМ-2

T, К	Z									
	1	1.1	1.3	1.5	1.7	1.9	2.1	2.3	2.5	2.7
298	-0.05	0.93	3.06	5.86	9.18	14.79	24.44	34.47	45.32	57.83
500	0.45	1.21	3.36	6.21	9.58	15.02	24.29	34.40	45.64	58.42
700	0.73	1.77	3.70	6.50	9.91	15.34	24.33	34.42	45.80	58.69
1000	1.03	2.11	4.23	6.94	10.42	16.13	24.73	34.45	45.56	58.19
2000	1.93	3.04	5.24	7.95	11.44	17.33	25.75	35.38	46.43	59.05
3000	2.72	3.82	6.10	8.87	12.51	18.51	26.86	36.47	47.56	60.18
5000	4.14	5.31	7.74	10.66	14.68	20.87	29.21	38.91	50.06	62.78
10000	7.66	9.04	11.93	15.49	20.20	26.95	35.58	45.57	57.17	70.21
15000	11.16	12.83	16.36	20.60	26.07	33.39	42.43	52.93	64.87	78.55
20000	14.73	16.71	20.87	25.89	32.12	40.04	49.49	60.59	73.20	87.21

Примечание. Выделены цветом ячейки с аномалией давления. Слабо закрашены интервалы с уменьшением объема при плавлении.

в настоящей работе, эти свойства должны совпадать или быть близкими к рассчитанным здесь. Однако вдали от этой адиабаты могут появиться различия в значениях этих свойств. Сравнение данных показывает, что эти различия действительно наблюдаются. В табл. 10 приведены свойства моделей натрия, рассчитанные в [5] и в настоящей работе при степени сжатия $Z = 2.3$. При высоких температурах различия в свойствах невелики, но они заметно возрастают с понижением температуры. Следовательно, хорошая точность описания ударной адиабаты не гарантирует такой же точности расчета свойств вдали от нее.

Как уже упоминалось, в [3, 5, 6] была обнаружена аномалия парной корреляционной функции моделей ОЦК натрия – зависящий от температуры предпик 1-го пика ПКФ. При степенях сжатия Z от 2.00 до 2.78 и температурах до 1000–1500 К при изохорном нагревании давление убывало, а коэффициент теплового расширения был

отрицательным, то есть наблюдалась аномалия по типу воды. Этот эффект был связан с отмеченным выше наличием участка парного вклада в потенциал ЕАМ с отрицательной второй производной (см. рис. 2). Переход от потенциала ЕАМ-1 к потенциалу ЕАМ-2 привел к понижению давления в области высоких степеней сжатия на 4–8 ГПа, предпик 1-го пика ПКФ исчез, однако интервалы отрицательной производной $(\partial p / \partial T)_V$ по-прежнему видны (табл. 9). Плавление в этом интервале давлений происходит с уменьшением объема.

В [17] были построены методом *ab initio* модели натрия с плотностью 1.936–2.42 г/см³ (степени сжатия $Z = 2–2.5$) и исследованы в режиме изохорного нагрева. Авторы [17] не обнаружили у моделей ОЦК натрия областей с отрицательным термическим коэффициентом давления и с аномалией предпика ПКФ. Наши МД-результаты с потенциалом ЕАМ-2 (табл. 9) отличаются от

Таблица 10. Сравнение результатов расчетов давления p (ГПа) и энергии E (кДж/моль) моделей натрия с потенциалами ЕАМ-1 [5] и ЕАМ-2 при $Z = 2.3$. Электронные вклады не добавлены

Источник	298 К	500 К	700 К	1000 К	2000 К	3000 К	5000 К	8290 К	10000 К	15000 К	20000 К
p [5]	43.22	42.36	39.66	38.85	38.66	39.18	40.82	43.95	45.65	50.51	55.44
P ЕАМ-2	34.47	34.40	34.42	34.43	35.30	36.29	38.40	41.86	43.58	48.72	53.68
E [5]	-2.95	4.09	14.08	27.90	58.74	82.20	122.7	182.3	211.4	292.8	372.1
E ЕАМ-2	-3.83	1.04	6.16	19.99	45.33	67.66	108.4	170.2	200.2	284.3	365.0

Таблица 11. Холодное давление моделей натрия с потенциалами ЕАМ-2 и ЕАМ-3

$Z = V_0/V$	1.1	1.3	1.5	1.7	1.9	2.1	2.3	2.5	2.7
[26]	0.79	2.94	5.91	9.72	14.4	20.0	26.5	33.9	42.36
[35]	0.69	2.60	5.27	8.69	12.8	17.7	23.4	29.7	36.8
[17]	—	—	—	—	—	20.0*	26.8*	33.7	—
ЕАМ-1	0.83	3.12	4.94	6.37	14.8	32.5	45.0	56.4	67.0
ЕАМ-2	0.93	3.06	5.86	9.18	14.8	24.4	34.5	45.3	57.8
ЕАМ-3	0.93	2.93	5.86	9.31	13.82	19.52	25.16	32.30	40.70
[28]	0.72	2.74	5.56	9.22	13.73	19.11	25.38	32.55	40.63

* Интер/экстраполяция.

данных [17] в сторону завышения давления на 3–11 ГПа, причем расхождение растет с увеличением степени сжатия. Вопрос аномалий обсуждается ниже.

“Холодное давление”. На первом этапе анализа мы определили давление на изотерме 298 К (“холодное давление”), используя приведенный выше потенциал ЕАМ-2, рассчитанный по форме ударной адиабаты. Результаты приведены в табл. 11. В таблице приведены также значения холодного давления, полученные экспериментально методом статического сжатия [28], а также значения, полученные в [26, 35] при обработке данных ударного сжатия методом, при котором вводятся приближения для теплоемкости и энергии решетки, а тепловая энергия и давление электронов не учитываются. Наблюдается неплохое согласие между расчетами [26] (без учета электронных вкладов) и данными метода *ab initio* в [17]. В таблице приведены также значения холодного давления, рассчитанные с потенциалом ЕАМ-1 из [3, 5, 6]. Потенциал ЕАМ-2 завышает холодное давление при $Z = 2.7$ на 17 ГПа по отношению к статическим данным [28].

Потенциал ЕАМ-3. Во втором варианте анализа потенциал погружения рассчитывали по значениям холодного давления на изотерме 298 К, измеренной в [28] методом статического сжатия в алмазных ячейках до величины ~ 100 ГПа. Значения параметров потенциала погружения этого варианта, отличные от ЕАМ-2, приведены в табл. 12. Величины холодного давления моделей натрия при 298 К с потенциалом ЕАМ-3 показаны в

табл. 11. Они очень хорошо согласуются с опытом [28] (стандартное отклонение 0.23 ГПа).

На рис. 5 показана ударная адиабата, рассчитанная с потенциалом ЕАМ-3 и с учетом электронных добавок. В этом варианте давления на адиабате сильно занижены по отношению к фактическим (на 41 ГПа при $Z = 2.7$), т.е. потенциал ЕАМ-3 не пригоден для расчета свойств в условиях ударного сжатия.

Сравнение потенциалов ЕАМ-2 и ЕАМ-3. Поскольку парные вклады и коэффициенты c_1 – c_6 в этих потенциалах совпадают, то различия в свойствах могут наблюдаться только в сжатых состояниях моделей, то есть при $Z > 1$. Для определенности выберем состояние, исследованное методом *ab initio* в [17]. Свойства моделей в этих состояниях приведены в табл. 13. Давления в моделях с потенциалом ЕАМ-2 заметно выше рассчитанных методом *ab initio*, а с потенциалом ЕАМ-3 – немного ниже. Следовательно, при невысоких температурах потенциал ЕАМ-3 оказывается предпочтительным по сравнению с ЕАМ-2.

На рис. 6 показана ПКФ модели натрия с потенциалом ЕАМ-3 при нормальном давлении и температуре 823 К в сравнении с дифракционной ПКФ [20]. В соответствии со сказанным выше, здесь невязка R_g немного ниже, чем при использовании ЕАМ-2 (рис. 1). Однако характер отклонений от дифракционной ПКФ такой же, как и на рис. 1.

В табл. 14 приведены некоторые данные о поведении давления при нагреве моделей с потенциалом ЕАМ-3. Аномалия давления при $Z = 2.1$ – 2.3 по-прежнему видна в области ОЦК фазы на-

Таблица 12. Параметры потенциала погружения EAM-3 натрия

Параметр	Значение	Параметр	Значение, эВ	Параметр	Значение, эВ	Параметр	Значение, эВ
1	2	3	4	5	6	7	8
ρ_6	1.35	a_7	-0.311567	b_7	0.113330	c_7	-0.043
ρ_7	3.40	a_8	-0.170612	b_8	0.066530	c_8	0.042
m	1.05	—	—	—	—	—	—
n	1.80	—	—	—	—	—	—

Таблица 13. Сравнение результатов с использованием потенциалов EAM-2 и EAM-3 (с учетом электронных вкладов) и *ab initio* [17]

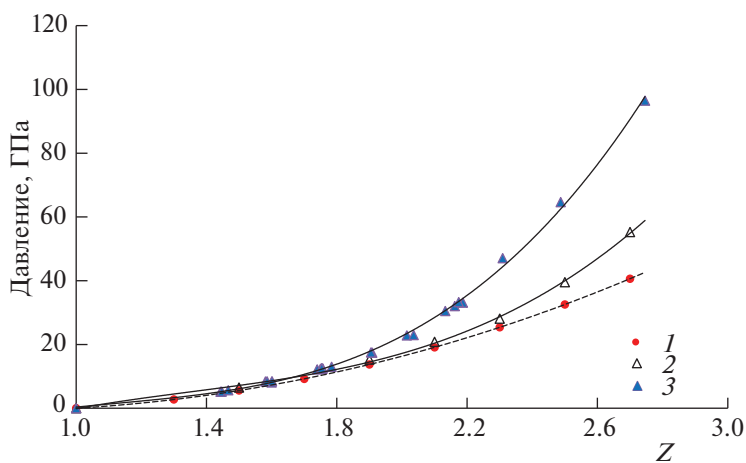
Свойства	EAM-2	EAM-3	[17]	EAM-2	EAM-3	[17]	EAM-2	EAM-3	[17]
Z		2.0			2.2			2.5	
T , К		900			900			900	
p , ГПа	20.37	16.98	17.6	29.33	22.06	24.3	45.51	32.25	34.0
E , кДж/моль	-21.08	-24.43	—	2.77	-4.12	—	49.72	29.90	—

трия. Сравнение с табл. 9 показывает, что интервалы параметров p и T с аномалией давления в случае потенциалов EAM-2 и EAM-3 совпадают. В [17] аномалия давления не обнаружена. Расхождение с данными [17] может быть связано с малостью эффекта (~ 0.1 ГПа), который метод *ab initio* не улавливает.

Эти результаты можно рассматривать как *ex-regimentum crucis* для модели погруженного атома. Очевидно, эта модель не справляется в должной мере с описанием температурной зависимости свойств. Поэтому расчетные параметры потенциала EAM оказываются различными при использовании экспериментальных данных, полученных при различных плотностях и температурах (например, как показано выше, при обычных условиях и при ударном сжатии). В случае данных табл. 13 температура 900 К гораздо ближе

к 298 К, чем к температурам на ударной адиабате ($\sim 10\,000$ К), и поэтому расчеты с потенциалом EAM-3 значительно ближе к данным опыта при 900 К, чем расчеты с EAM-2. Наоборот, для предсказания свойств при высоких температурах и давлениях более точным должен быть потенциал EAM-2.

Расчет линии плавления натрия. Температуру плавления моделей определяли методом отогрева [5, 19] при различных давлениях в режиме NpT . Изотермические прогоны длиной 5000 шагов по времени при длине шага $0.01t_0$ или $0.005t_0$ повторяли до тех пор, пока не становилось ясно, что при данной температуре плавление не наступит. Затем температуру немного повышали и снова повторяли прогоны. Факт плавления определялся по резкому возрастанию среднего квадрата

**Рис. 5.** Холодное давление и ударная адиабата натрия; 1 — статические данные при 298 К [28] и давление при 298 К с потенциалом EAM-3, 2 — ударная адиабата с потенциалом EAM-3, 3 — реальная ударная адиабата [26, 27].

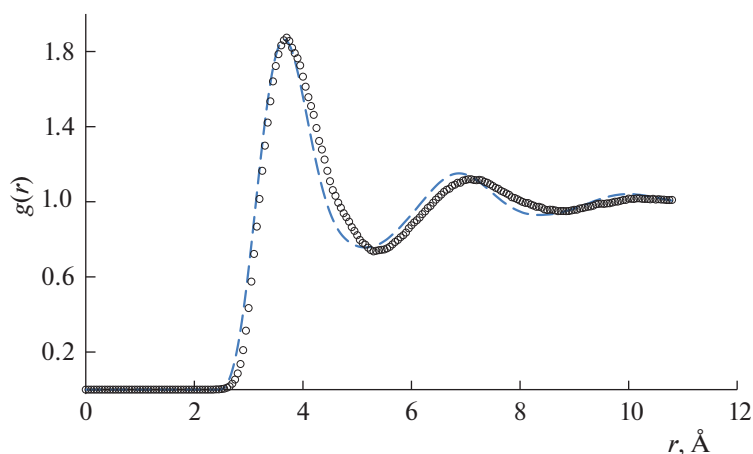


Рис. 6. Парные корреляционные функции натрия при 823 К и плотности 0.825 г/см^3 с потенциалом ЕАМ-3. Давление 0.031 ГПа. Невязка $R_g = 0.067$. Штриховые линии – дифракционные данные [20], маркеры – метод МД с потенциалом ЕАМ-3.

смещений частиц и по сильному падению максимальных значений структурного фактора $S(\mathbf{K})$:

$$S(\mathbf{K}) = \frac{1}{N} \left| \sum_i e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}_i} \right|^2, \quad (12)$$

где \mathbf{K} – вектор рассеяния, \mathbf{R}_i – координаты атомов, и усреднение по всем направлениям не проводится. В случае кристаллической структуры модели структурный фактор принимает максимальные значения в направлении векторов узлов обратной решетки. Для проверки степени изотропности модели следует рассчитать по выражению (12) структурный фактор при различных направлениях вектора \mathbf{K} . Максимальные значения $S(K)$ кристалла близки к числу атомов в основном кубе. При переходе в жидкое состояние эти значения резко убывают (до 15–20).

Найденные методом МД значения температур плавления T_m приведены в табл. 15.

Эти результаты показаны на рис. 7 в сравнении с экспериментальными данными по сжатию натрия в алмазных ячейках [21] и с расчетами температуры плавления T_m методом *ab initio* [12, 13]. Несмотря на значительный разброс, видно, что потенциал ЕАМ-2 завышает температуру плавления, а ЕАМ-3 ее занижает. Близкий к экспериментальным данным [21] максимум на расчетной линии плавления удалось получить при описанном выше выборе формы парного вклада в потенциал ЕАМ при $r < 2.90 \text{ \AA}$. Иной выбор парного вклада в потенциал на малых расстояниях, примененный в [5], приводил к значительному завышению температур плавления (до 1256 К в максимуме при давлении 20 ГПа).

Таблица 14. Давление моделей натрия с учетом электронных вкладов, ГПа; потенциал ЕАМ-3

T, К	Z					
	1.5	1.9	2.1	2.3	2.5	2.7
298	5.86	13.82	19.52	25.16	32.30	40.70
500	6.21	13.98	19.33	25.08	32.57	41.24
700	6.51	14.22	19.32	25.05	32.68	41.39
1000	6.95	14.74	19.52	24.93	32.28	40.72
2000	7.96	15.59	20.27	25.70	33.02	41.39
3000	8.88	16.47	21.17	26.69	34.03	42.40
5000	10.65	18.40	23.17	28.87	36.34	44.78
10000	15.29	23.78	29.06	35.20	42.99	51.80
15000	20.16	29.70	35.51	42.22	50.50	59.69
20000	25.25	35.93	42.28	49.52	58.46	68.19
25000	30.40	42.36	49.36	57.14	66.73	76.93

Примечание. Выделены цветом ячейки с аномалией давления. Слабо закрашены интервалы с уменьшением объема при плавлении.

Таблица 15. Температура плавления моделей натрия

Потенциал	Давление p , ГПа										
	0	5	10	20	30	40	50	60	75	80	100
[12]	–	620	–	770	900	850	–	710	550	500	400
[13]	–	–	790	870	920	940	–	910	–	900	840
ЕАМ-1	358	–	1206	1256	1047	806	–	–	–	–	–
ЕАМ-2	406	731	794	894	932	906	868	–	630 fcc	–	518 fcc
ЕАМ-3	406	735	768	872	832	768	706	644	556	–	–
[21]	370	625	700	915	990	960	860	725	690	690	425

В случае реальных металлов аналогичные максимумы наблюдаются не только у натрия, но и у лития [36], калия [37, 38], рубидия [37, 39] и цезия [37]. Причина этой особенности заключается в том, что сжимаемость жидкости выше сжимаемости кристалла, и при высоких давлениях объем жидкости становится меньше объема твердой фазы, так что получается изменение объема при плавлении $\Delta V_m < 0$. Эта особенность характерна для жидкостей с высокой сжимаемостью – щелочных металлов. С ростом крутизны отталкивательной ветви парного вклада в потенциал ЕАМ температура плавления моделей повышается. Поэтому согласие расчетных T_m натрия с опытом при давлении свыше 80 ГПа можно попытаться еще улучшить, изменяя эту крутизну в соответствующем интервале межчастичных расстояний.

Как видно из табл. 16, теплота плавления моделей $\Delta H = \Delta U + p\Delta V$ проходит через максимум вблизи давления 12 ГПа, а изменение объема при плавлении ΔV_m меняет знак при давлении около 30 ГПа, т.е. при $p > 30$ ГПа плотность жидкости на линии плавления выше плотности твердой фазы. В соответствии с уравнением Клапейрона–Клаузиуса, при $p > 30$ ГПа производная $dT_m/dp = T_m \Delta V/\Delta H < 0$, и температура плавления с ростом давления понижается в согласии с опытом. Рас-

четы температуры плавления методом *ab initio* [12, 13] также приводят к максимуму на линии плавления.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Из изложенного выше следует, что модель погруженного атома не дает согласия с опытом на широких интервалах температуры и поэтому имеет в этих условиях ограниченную предсказательную силу. В формальной схеме ЕАМ зависимость свойств модели от температуры обеспечивается изменением эффективной электронной плотности $\langle \rho \rangle$. Эта плотность меняется в случае 1) изменения объема металла и 2) изменений структуры жидкости. Ведущим фактором температурных изменений свойств в ЕАМ является тепловое расширение. И в том, и в другом случае давление изменяется пропорционально множителю $d\Phi/d\rho$ (формула (3)). Поэтому скорости изменения свойств при нагревании и при изотермическом сжатии внутренне связаны друг с другом. Если функция $\psi(r)$ задана, то функция $\Phi(\rho)$ определяется по данным для давления на изотерме 298 К или на ударной адиабате практически однозначно. Задачей дальнейших исследований является выяснение того, можно ли удачным выбором функций $\psi(r)$ и $\Phi(\rho)$ добиться согласования по-

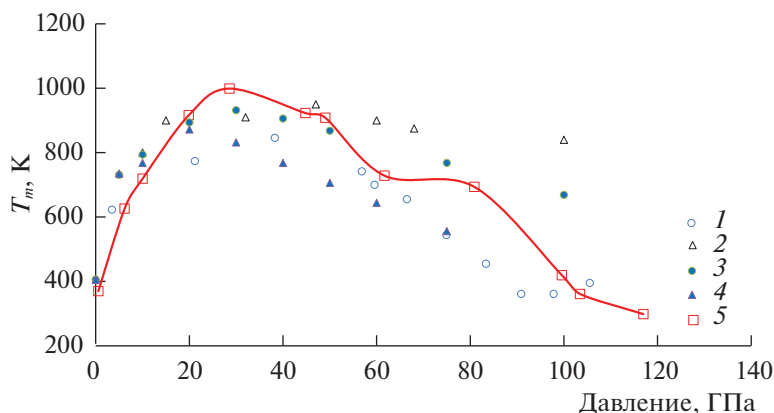


Рис. 7. Температура плавления натрия; 1 – расчеты методом *ab initio* [12], 2 – расчеты методом *ab initio* [13], 3 – метод МД с потенциалом ЕАМ-2, 4 – метод МД с потенциалом ЕАМ-3, 5 – сжатие в алмазных ячейках [21].

Таблица 16. Зависимость параметров плавления моделей ОЦК натрия от давления. Потенциал ЕАМ-2

p , ГПа	T_m , К	ΔV_m , см ³ /моль	ΔH_m , кДж/моль	dT_m/dp , К/ГПа
0	406	1.0359	2.565	164
5	731	0.0732	3.416	15.7
10	794	0.1382	8.462	13.0
20	894	0.0492	8.128	5.42
30	932	0.0039	5.341	0.68
40	906	-0.0176	4.966	-3.21
50	868	-0.0257	4.886	-4.56
75	768	-0.0276	4.441	-4.77
100	669	-0.0198	3.543	-3.73

тенциалов погружения, рассчитанных по данным для различных температур, и достичь тем самым реабилитации модели погруженного атома.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Daw M.S., Baskes M.I.* // Phys. Rev. B. 1984. V. 29. № 12. P. 6443.
2. *Norman G.E., Stegailov V.V.* // Math. Models and Computer Simulations. 2013. V. 5. № 4. P. 305.
3. *Белащенко Д.К.* // ТВТ. 2009. Т. 47. № 4. С. 522.
4. *Белащенко Д.К.* // Physics—uspekhi. 2013. V. 183. № 12. P. 1176.
5. *Belashchenko D.K.* Liquid metals. From Atomistic Potentials to Properties, Shock Compression, Earth's Core and Nanoclusters. 2018. Ed. Nova Science Publ.
6. *Белащенко Д.К.* // ТВТ. 2013. Т. 51. № 5. С. 697.
7. *Gonzalez Miranda J.M., Torra V.* // J. Phys. F: Metal Phys. 1983. V. 13. № 2. P. 281.
8. *Polukhin V.A., Bratkovskii A.M., Vaks V.G.* // Phys. Status Solidi B. 1985. V. 130. № 1. P. 87.
9. *Belashchenko D.K.* // Inorgan. Materials. 2012. V. 48. № 1. P. 79.
10. *Belashchenko D.K.* // High Temper. 2012. V. 50. № 3. P. 331.
11. *Metya A.K., Hens A., Singh J.K.* // Fluid Phase Equilibria. 2012. V. 313. P. 16.
12. *Raty J.Y., Schwegler E.R., Boney S.A.* Electronic and Structural Transitions in Dense Liquid Sodium // UCRL-TR-233403, 2007.
13. *Koči L., Ahuja R., Vitos L., Pinsook U.* // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. 132101.
14. *Kresse G.J.* // J. Non-Crystalline Solids. 1995. V. 192–193. P. 222.
15. *Silvestrelli P.L., Alavi A., Parrinello M.* // Phys. Rev. B: Condens. Matter. 1997. V. 55. № 23. P. 15515.
16. *Senda Y., Shimojo F., Hoshino K.* // J. Phys. Soc. Japan. 1998. V. 67. P. 2753.
17. *Левашов В.П., Минаков Д.В., Фокин Л.Р.* // Вестн. ОИВТ РАН. 2018. Т. 1. № 1. С. 47.
18. *Schommers W.* // Phys. Rev. A. 1983. V. 28. P. 3599.
19. *Белащенко Д.К.* Компьютерное моделирование жидких и аморфных веществ: Научное издание. М.: МИСИС, 2005. 408 с.
20. *Waseda Y.* The Structure of Non-crystalline Materials. Liquids and Amorphous Solids. N.Y.: McGraw-Hill, 1980. 325 p.
21. *Gregoryanz E., Degtyareva O., Somayazulu M. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 94. 185502.
22. *Zha C.-S., Boehler R.* // Phys. Rev. B. 1985. V. 31. P. 3199.
23. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. (М.: ГИТТЛ, 1951)
24. Данные на сайте: www.webelements.com
25. *Быстров П.И., Казан Д.Н., Кречетова Г.А., Шпильрайн Э.Э.* Жидкометаллические теплоносители тепловых труб и энергетических установок. М.: Наука, 1988. 264 с.
26. *Баканова А.А., Дудолодов И.П., Трунин Р.Ф.* // ФТТ. 1965. Т. 7. С. 1615.
27. LASL Shock Hugoniot Data. Ed. Marsh S.P. Berkeley: Univ. California Press, 1980.
28. *Hanfland M., Loa I., Syassen K.* // Phys. Rev. B. 2002. V. 65. P. 184109.
29. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Механика сплошных сред. М.: Гостехтеориздат, 1954. 796 с.
30. *Белащенко Д.К.* // Журн. физ. химии. 2013. Т. 87. № 4. С. 633.
31. *Fink J.K., Leibowitz L.* Thermodynamic and Transport Properties of Sodium Liquid and Vapor // Argonne Nat. Lab. ANL-RE-95/2, 1995.
32. *Meyer R.E., Nachtrieb N.H.* // J. Chem. Phys. 1955. V. 23. P. 1851.
33. *Белащенко Д.К.* // ТВТ. 2017. Т. 55. № 1. С. 51.
34. *Ohse R.W.* Handbook of Thermodynamics and Transport Properties of Alkali Metals. 1st ed., Blackwell, Oxford, 1985.
35. *Grover R., Keeler R.N., Rogers F.J., Kennedy G.C.* // J. Phys. Chem. Solids. 1969. V. 30. P. 2091.
36. *Guillaume Ch.L., Gregoryanz E., Degtyareva O. et al.* // Nature Phys. 2011. V. 7. P. 211.
37. *Boehler R., Zha C.-S.* // Physica B+C. 1986. V. 139. P. 233.
38. *McBride E.E.* On Structural Studies of High-Density Potassium and Sodium. Thesis. Univ. of Edinburg. 2013.
39. *Bundy F.P.* // Phys. Rev. 1959. V. 115. № 2. P. 274.