

Квантовые расчеты теплофизических свойств жидких металлов

Левашов П.Р.^{1,®} и Минаков Д.В.¹

¹ Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, Ижорская ул., 13, стр. 2, Москва, 125412, Россия

® pasha@jiht.ru

Жидкие металлы представляют собой чрезвычайно сложные физические системы, теоретическое описание которых сильно затруднено. Электронная подсистема в жидких металлах, как правило, сильно вырождена, а межэлектронное взаимодействие является достаточно существенным, поэтому классическое описание для этого случая неприменимо. Ионная подсистема является сильновзаимодействующей, а теоретические подходы для случая сильной неидеальности до настоящего времени не разработаны. Таким образом, жидкие металлы представляют собой сильно-неидеальную кулоновскую систему с вырожденной электронной подсистемой, и для получения ее свойств необходимо привлекать квантовые методы моделирования.

Сегодня наиболее точным методом моделирования двухкомпонентных кулоновских систем является метод квантовой молекулярной динамики (КМД). В основе КМД лежит метод функционала электронной плотности, имеющий строгое теоретическое обоснование. При моделировании методом КМД ионы считаются классическими точечными частицами и движутся под действием сил со стороны других ионов и электронов, а электроны мгновенно подстраиваются под текущее положение ионов. Описанный подход позволяет рассчитывать целый комплекс теплофизических свойств в широком диапазоне параметров, включая структурные, термодинамические, электронные и ионные транспортные, а также оптические свойства.

В докладе будут представлены результаты для ряда металлов по расчетам уравнения состояния, структурного фактора, теплоемкости, ударных адиабат и изоэнтроп разгрузки, коэффициентов электропроводности и электронной теплопроводности, самодиффузии, вязкости и отражательной способности. Также бу-

дуг обсуждаться методы оценки критических параметров. Будут подробно рассмотрены результаты расчетов для натрия, свинца, молибдена, вольфрама, циркония в сравнении с имеющимися экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ No. 24-19-00746.