

## **Свободная энергия Гельмгольца жидкого Na в вариационном методе с системой сравнения прямоугольной ямы**

© Дубинин Николай Эдуардович, Филиппов<sup>+</sup> Владимир Викторович,  
Юрьев Анатолий Аркадьевич и Ватолин\* Николай Анатольевич

Институт металлургии УрО РАН. Ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Свердловская область. Россия. Тел.: (343) 232-91-69. E-mail: [vyfilippov@mail.ru](mailto:vyfilippov@mail.ru)

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** термодинамическая теория возмущений, вариационный метод, модель прямоугольной ямы, средне-сферическое приближение, жидкий металл.

### **Аннотация**

Исследуется возможность использования в вариационном методе термодинамической теории возмущений новой системы сравнения – модели прямоугольной ямы, которая рассматривается в предложенной нами недавно полуаналитической модификации средне-сферического приближения.

Предложен способ минимизации свободной энергии, в котором используется только один свободный параметр прямоугольной ямы (диаметр твердого остова), а два других определяются из двух дополнительных условий. Для определения одного из них (глубины прямоугольной ямы) предлагается использование условия равенства структурно-зависящей части потенциальной энергии, вычисленной с парным потенциалом из метода псевдопотенциала, и потенциальной энергии в модели прямоугольной ямы. Определение второго параметра (ширины прямоугольной ямы) достигается фиксацией ее правой границы в точке второго пересечения эффективного парного потенциала с осью абсцисс. Дополнительно проводится минимизация свободной энергии по среднему атомному объему.

Для описания эффективного парного взаимодействия используются модельный псевдопотенциал Анималу-Хейне в локальном приближении и обменно-корреляционная функция Вашишты-Сингви, хорошо зарекомендовавшие себя ранее в расчетах термодинамических свойств металлических расплавов вариационным методом с системой сравнения твердых сфер.

Процедура расчета состоит в том, что при заданном среднем атомном объеме, используя указанные выше два дополнительных условия, вначале рассчитывается зависимость свободной энергии от диаметра твердого остова, а затем определяется значение диаметра твердого остова, дающего минимальное значение свободной энергии. Далее данная операция выполняется для других атомных объемов и в результате определяется глобальный минимум на поверхности свободной энергии, как функции двух переменных: диаметра твердого остова и среднего атомного объема.

Подход применен к жидкому натрию вблизи температуры плавления. Исследована зависимость свободной энергии жидкого натрия от диаметра твердого остова и среднего атомного объема, на которой обнаружен один глобальный минимум. Полученные в точке глобального минимума значения свободной энергии, среднего атомного объема, внутренней энергии и энтропии очень хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Таким образом, показана перспективность модели SW в качестве системы сравнения в вариационном методе для изучения свойств жидких металлов.