

**И. КИСЕЛЕВ**

**В. И. КОНОНЕНКО**

**ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  
РАСПЛАВОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ  
МЕТАЛЛОВ: ЧИСЛЕННЫЕ ОЦЕНКИ**

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ  
ИНСТИТУТ ХИМИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

*А.И. Киселев, В.И. Кононенко*

**ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ  
СВОЙСТВА РАСПЛАВОВ  
РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ:  
ЧИСЛЕННЫЕ ОЦЕНКИ**

ЕКАТЕРИНБУРГ, 2003

УДК 541.123 + 546.621 + 546.654

**Киселев А.И., Кононенко В.И. Теплофизические свойства расплавов редкоземельных металлов: численные оценки.** Екатеринбург: УрО РАН, 2003. ISBN 5—7691—1251—4.

Книга является существенным дополнением к немногим попыткам описать свойства жидких металлов со сложной электронной и атомной структурой (редкоземельные *f*-переходные металлы составляют более 30 % всех известных металлов), используя численные методы теории конденсированного состояния. Показана эффективность моделей псевдопотенциала, твердосферной жидкости и т. д. не только в описании кинетических и термодинамических свойств, но и в физико-химическом анализе собственно электронной структуры жидких РЗМ, особенностей межчастичного взаимодействия в двойных сплавах РЗМ с алюминием. Эффективность разработок авторов подтверждается многочисленными примерами расчета кинетических и термодинамических свойств жидких редкоземельных металлов и их двойных сплавов с другими металлами.

Книга интересна широкому кругу научных работников, полезна также аспирантам и студентам вузов и инженерно-техническим работникам соответствующих специальностей.

Ответственный редактор  
канд. физ.-мат. наук **В.А. Крашенинин**  
Рецензент  
член-корреспондент РАН **Э.А. Пастухов**

ISBN 5—7691—1251—4  
К ПРИ-2002—16(02)—3 ПВ—2003  
8П6(03)1998

© Киселев А.И.,  
Кононенко В.И.,  
2003 г.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

---

<b>ВВЕДЕНИЕ</b> .....	3
<b>ГЛАВА I. МОДЕЛЬНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ</b> .....	12
1. Неупорядоченные системы .....	12
2. Электроны в неупорядоченных металлах .....	18
3. Псевдопотенциал в редкоземельных металлах .....	21
4. Структурные характеристики жидких РЗМ .....	26
5. Термодинамическая теория возмущений .....	32
Выводы .....	36
<b>ГЛАВА II. ВЫЧИСЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛЬНЫХ СИСТЕМ</b> .....	37
Введение .....	37
1. Модельные псевдопотенциалы .....	40
2. Самосогласованная процедура определения параметров модельных систем .....	46
3. Модельные параметры простых металлов .....	48
4. Модельные параметры редкоземельных металлов .....	56
5. Влияние обменно-корреляционных эффектов .....	63
6. Сравнение результатов экспериментального и численного исследования структурных характеристик жидких металлов .....	67
Выводы .....	74
<b>ГЛАВА III. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РАСПЛАВОВ РЗМ</b> .....	75
Введение .....	75
1. Внутренняя энергия расплавов РЗМ .....	76
2. Энтропия расплавов РЗМ .....	79
3. Дифференциальные термодинамические характеристики расплавов РЗМ .....	88
4. Поведение дифференциальных термодинамических характеристик при варьировании начальных параметров расчетной схемы .....	95
5. Внутреннее давление жидких металлов .....	99
Выводы .....	102
<b>ГЛАВА IV. ЧИСЛЕННАЯ ОЦЕНКА МОДЕЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ ЖИДКИХ МЕТАЛЛОВ С УЧЕТОМ ХАРАКТЕРИСТИК ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ</b> .....	103
Введение .....	103
1. Модельные параметры, установленные с учетом эффективной массы электронов .....	105
	363

2. Методика оценки параметра обменно-корреляционного взаимодействия .....	109
3. Определение модельных параметров в приближениях КК с учетом эффективной массы электронов .....	117
Выводы .....	120
<b>ГЛАВА V. ПОТЕНЦИАЛ МЕЖЧАСТИЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ЖИДКИХ РЗМ</b> .....	121
Введение .....	121
1. Характеристики межчастичного потенциала в жидких РЗМ .....	125
2. Межионные потенциалы жидких РЗМ, полученные с учетом эффективной массы электронов .....	138
3. Модельные параметры жидких РЗМ в приближении парных взаимодействий .....	145
4. Характеристики влияния на свойства расплавов РЗМ притягивающей части потенциала взаимодействия .....	149
Выводы .....	159
<b>ГЛАВА VI. КИНЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ</b> .....	160
Введение .....	160
1. Коллективные колебания в ионной подсистеме жидких РЗМ .....	161
2. Коэффициенты самодиффузии расплавов простых металлов .....	171
3. Коэффициенты динамической вязкости расплавов простых металлов .....	179
4. Коэффициенты динамической вязкости расплавов РЗМ .....	183
5. Взаимосвязь коэффициентов динамической вязкости РЗМ и характеристик их межионного потенциала .....	187
Выводы .....	191
<b>ГЛАВА VII. ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ РАСПЛАВОВ АЛЮМИНИЯ С РЗМ</b> .....	193
Введение .....	193
1. Термодинамические характеристики и плотности расплавов систем алюминия с легкими РЗМ .....	197
2. Оценка температур линии ликвидуса фазовых диаграмм систем алюминий — легкие РЗМ .....	207
3. Численное исследование свойств расплавов алюминия с легкими РЗМ в области малых добавок РЗМ .....	228
4. Оценка кинетических характеристик расплавов Al—РЗМ .....	234
Выводы .....	244
<b>ГЛАВА VIII. ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РАСПЛАВОВ РЗМ</b> ....	246
Введение .....	246
1. Дисперсия оптических характеристик РЗМ в модели почти свободных электронов .....	251
2. Влияние межполосных переходов электронов: методика оценки их электронных характеристик .....	256

3. Результаты анализа экспериментальных данных по оптическим свойствам расплавов РЗМ .....	267
4. Оптические свойства расплавов Al и Al—Se .....	275
5. Оценка эффективной массы электронов в жидком церию из характеристик межзонных переходов, индуцированных светом .....	280
Выводы .....	291
<b>ОБЩИЕ ВЫВОДЫ</b> .....	293
<b>СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ</b> .....	298
<b>ПРИЛОЖЕНИЯ</b> .....	307
1. Система единиц .....	307
2. Принятые сокращения .....	308
3. Принятые обозначения .....	309
4. Методика расчета структурного фактора жидкости твердых сфер .	312
5. Внутренняя энергия жидкого металла .....	314
6. Магнитный вклад во внутреннюю энергию и энтропию .....	320
7. Процедура самосогласования потенциала по Хартри .....	324
8. Учет обменно-корреляционных эффектов .....	327
9. Модельные параметры .....	331
10. Статическая проводимость жидких металлов .....	337
11. Потенциалы межчастичного взаимодействия в проводящих жидкостях .....	339
12. Методика расчета кинетических характеристик жидких металлов .	347
13. Свободная энергия бинарных металлических сплавов .....	351
14. Методика расчета парциальных структурных факторов бинарной жидкости твердых сфер .....	354
15. Оптические характеристики жидких РЗМ .....	357