



**XVI**

**Международная школа-конференция  
"Проблемы физики твердого тела  
и высоких давлений"**

**Идеи и методы  
физики  
конденсированного  
состояния, II**

**Сочи, пансионат "Буревестник"  
15-25 сентября 2017г.**

**ТЕЗИСЫ**

XVI Международная школа-конференция  
"Проблемы физики твердого тела  
и высоких давлений"

Идеи и методы  
физики конденсированного состояния  
II

Сочи, пансионат "Буревестник"  
15 - 25 сентября 2017г.

тезисы

Москва, ФИАН 2017

## СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ И МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО ТАНТАЛА

Хуснутдинов Р.М., Мокшин А.В.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,  
Институт физики, Казань, Россия  
khrm@mail.ru*

Выполнены крупномасштабные молекулярно-динамические исследования равновесного и переохлажденного тантала. Моделирование выполнено в рамках квантовомеханического метода Кара-Парринелло и классического метода атомарной/молекулярной динамики с ЕАМ-потенциалом [1]. Анализ структурных особенностей тантала выполнен на основе расчета статического структурного фактора, функции углового распределения и радиальной функции распределения двух и трех частиц [2]. На основе расчета параметра порядка Вендта-Абрахама-Равеше и парной конфигурационной энтропии определена критическая температура, характеризующая переход из области равновесной жидкости в область переохлажденного расплава. Определены температурные зависимости коэффициента самодиффузии, вязкости и теплопроводности, которые для области равновесного расплава хорошо воспроизводятся термоактивационным законом Аррениуса, а также удовлетворяют масштабным соотношениям Розенфельда [3]. Исследование атомарных коллективных возбуждений равновесного и переохлажденного расплава тантала выполнено на основе расчета спектральных плотностей временных корреляционных функций продольного и поперечного потоков. Определены законы дисперсий продольной и поперечной поляризации для широкой области значений волновых чисел. Описание микроскопической коллективной динамики атомов расплава тантала выполнено в рамках микроскопической теоретической модели [4].

Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты были выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета и суперкомпьютере Межведомственного Суперкомпьютерного Центра Российской Академии Наук. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МД-5792.2016.2.

## Литература

1. L. Zhong, J. Wang, H. Sheng, Z. Zhang, S.X. Mao, Nature, 5 2014
1. B. N. Galimzyanov, A. V. Mokshin, Physica A, 478, 103, 201
2. Y. Rosenfeld, J. Phys.: Condens. Matter, 11, 5415, 1999
3. R.M. Yulmetyev, A.V. Mokshin, P. Hänggi, Phys. Rev. 051201, 2003