



**XXI Всероссийская конференция**

**ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ  
ТВЁРДОГО ТЕЛА  
И ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ**

**Сочи, пансионат «Буревестник»  
23 сентября – 2 октября 2022 г.**

**ТЕЗИСЫ**

Министерство науки и высшего образования РФ  
Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН  
Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН  
Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова

XXI Всероссийская конференция  
«Проблемы физики твердого тела  
и высоких давлений»

г. Сочи, пансионат «Буревестник»  
23 сентября – 2 октября 2022 г.

ТЕЗИСЫ

Москва, ФИАН 2022

УДК 538.9(043.2)  
ББК В37я431 + В367.1я431

Главный редактор В. Н. Рыжов д.ф.-м.н. (ИФВД РАН)  
Ответственный редактор В. Е. Анкудинов к.ф.-м.н. (ИФВД РАН)

**Редакционная коллегия:** В. В. Бражкин, академик РАН, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН); П. И. Арсеев, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФИАН); А. А. Федянин, д.ф.-м.н., проректор (МГУ им. М. В. Ломоносова); В. Е. Антонов, д.ф.-м.н. (ИФТТ РАН); М. М. Глазов, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН); С. В. Демишев, д.ф.-м.н. (ИОФ РАН); Е. Н. Циок, к.ф.-м.н. (ИФВД РАН)

Проблемы физики твердого тела и высоких давлений:  
К26 Тезисы XXI Всероссийской конференции, г. Сочи, пансионат «Буревестник», 23 сентября – 2 октября 2022 г. – Москва–Сочи: Изд-во ФИАН, 2022. – 167 с.

Problems of solid state physics and high pressure science:  
Abstracts of the XXI All-Russian Conference, Sochi, “Burevestnik” pension, September, 23 – October, 2, 2022. – Moscow–Sochi: LPI RAS Publ., 2022. – 167 p.

**ISBN 978-5-902622-45-1**

XXI Всероссийская конференция «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений» продолжает регулярную серию школ, которые проводились Институтом физики высоких давлений РАН каждые два года, начиная с 1989 г. С 2015 года Школа-конференция проводится ежегодно совместно с Физическим институтом РАН. В данный сборник входят как тезисы лекций приглашенных лекторов, так и тезисы оригинальных докладов молодых участников.

**ISBN 978-5-902622-45-1**

УДК 538.9(043.2)  
ББК В37я431 + В367.1я431

© Коллектив авторов, 2022  
© ФИАН, 2022

# ПОСТРОЕНИЕ СЕМЕЙСТВА СФЕРИЧЕСКИ-СИММЕТРИЧНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ ГРУППЫ ЖИДКИХ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

Хабибуллин Р. А., Мокшин А. В.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,*

*Институт физики, г. Казань, Россия*

*roman.khabibullin@outlook.com*

Щелочные металлы имеют широкое применение в различных отраслях современной промышленности и энергетики. Жидкие щелочные металлы могут быть использованы в качестве теплоносителей в ядерных реакторах и ракетных двигателях благодаря высокой теплоемкости и теплопроводности, а также благодаря тому, что их жидкая фаза реализуется вдоль широкого диапазона температур. В связи с этим высокий интерес представляет задача разработки потенциалов межчастичного взаимодействия для данной группы металлов.

Исходя из предположения об универсальности межчастичных взаимодействий в жидких щелочных металлах, мы использовали существующий парный потенциал для жидкого лития [1] в качестве основы для разрабатываемого семейства потенциалов. Методами машинного обучения получены сферически-симметричные потенциалы для жидкого натрия, калия и рубидия. Восстановление потенциалов выполнялось по экспериментальным структурным данным неупругого рассеяния рентгеновских лучей [2]. Все полученные потенциалы с высокой точностью воспроизводят экспериментальную структуру. Также нами рассматривается задача восстановления потенциалов по экспериментально измеряемым транспортным характеристикам — вязкости [3] и коэффициенту самодиффузии [4] вблизи линии насыщения.

Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 19-12-00022-П) и Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (проект № 20-1-2-38).

## Литература

1. L. E. Gonzalez, D. J. Gonzalez, M. Silbert, J. A. Alonso, J. Phys.: Condens. Matter, **5**, 4283, 1993