

## 液态金属Li的表面张力及其温度导数计算

李树山

中国科学院力学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 本文用梯度近似下的密度泛函理论计算了液态金属Li的表面张力及其温度导数, 本文提出了一种确定四个计算参数的新方法, 即由液体在熔点和零压下的等温压缩系数与密度的实验值以及定义式 $\eta = \pi / 6\sigma^3 n$ 和极值条件 $dF/d\eta = 0$ 来联立求解赝势参数, 刚球直径 $\sigma$ 和刚球填充分数 $\eta$ 四个待定参数, 计算的表面张力及其温度导数与实验值符合较好。

**关键词** [表面张力](#) [液态金属Li](#) [密度泛函理论](#)

分类号

## CALCULATION OF THE SURFACE TENSION OF LIQUID METAL LI AND ITS TEMPERATURE DERIVATIVE

中国科学院力学研究所

### Abstract

The surface tension of liquid metal Li and its temperature derivative are calculated using the density-functional theory within the gradient approximation[1]. A new method for the determination of four parameters is proposed. In the method the pseudopotential parameters  $r_c$  and  $r_{co}$ , the hard-sphere diameter  $\sigma$ , and the hard-sphere packing fraction  $\eta$  are evaluated simultaneously using the experimental data of the isothermal compressibility and density of the liquid at meltingpoint and zero pressure, the defini...

**Key words** [surface tention](#) [liquid metal Li](#) [density-functional theory](#)

DOI:

通讯作者

### 扩展功能

#### 本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(226KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

#### 服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

#### 相关信息

- ▶ 本刊中 [包含“表面张力”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

· [李树山](#)