

Первопринципный анализ аномальности термодинамических свойств жидкого натрия вблизи кривой плавления при двукратном сжатии

- [1] Григорьев И. С., Мейлихов Е. З. Физические величины. Справочник. — Энергоатомиздат, 1991.
- [2] Equation of state of the liquid alkali metals. I. / N. B. Vargaftik, V. A. Alekseev, V. F. Kozhevnikov et al. // J. Eng. Phys. Thermophys. — 1978. — Vol. 35, no. 5. — P. 1361–1366.
- [3] Shaw George H., Caldwell D. A. Sound-wave velocities in liquid alkali metals studied at temperatures up to 150 C and pressures up to 0.7 GPa // Phys. Rev. B. — 1985. — Vol. 32, no. 12. — P. 7937.
- [4] Жидкометаллические теплоносители тепловых труб и энергетических установок / П. И. Бытров, Д. Н. Каган, Г. А. Кречетова, Э. Э. Шпильрайн. — М. : Наука, 1988.
- [5] Ломоносов И. В. Фазовые диаграммы и термодинамические свойства металлов при высоких давлениях и температурах. Дисс. ... д-ра физ.-мат. наук. — Черноголовка : ИПХФ РАН, 1999.
- [6] Khishchenko K. V. Equations of state for two alkali metals at high temperatures // J. Phys.: Conf. Ser. — 2008. — Vol. 98, no. 3. — P. 032023.
- [7] Е. Г. Максимов, М. В. Магницкая, В. Е. Фортов. Непростое поведение простых металлов при высоких давлениях // УФН. — 2005. — Т. 175, № 8. — С. 793–813. — Режим доступа: <https://ufn.ru/ru/articles/2005/8/a/>.
- [8] Melting of dense sodium / Eugene Gregoryanz, Olga Degtyareva, Maddury Somayazulu et al. // Phys. Rev. Lett. — 2005. — Vol. 94, no. 18. — P. 185502.
- [9] Transparent dense sodium / Yanming Ma, Mikhail Eremets, Artem R Oganov et al. // Nature. — 2009. — Vol. 458, no. 7235. — P. 182.
- [10] Белашенко Д. К. Применение модели погруженного атома к жидким металлам. Жидкий натрий // ТВТ. — 2009. — Т. 47, № 4. — С. 522–535.
- [11] Li Shasha, Chen Yue. Abnormal negative thermal expansion of sodium: A first-principles discovery at high pressures // Phys. Rev. B. — 2017. — Vol. 96, no. 13. — P. 134104.
- [12] Negative thermal expansion in functional materials: controllable thermal expansion by chemical modifications / Jun Chen, Lei Hu, Jinxia Deng, Xianran Xing // Chem. Soc. Rev. — 2015. — Vol. 44, no. 11. — P. 3522–3567.
- [13] Negative thermal expansion from 0.3 to 1050 Kelvin in ZrW₂O₈ / T. A. Mary, J. S. O. Evans, T. Vogt, A. W. Sleight // Science. — 1996. — Vol. 272, no. 5258. — P. 90–92.
- [14] Tsuchiya Yoshimi. The anomalous negative thermal expansion and the compressibility maximum of molten Ge-Te alloys // J. Phys. Soc. Jpn. — 1991. — Vol. 60, no. 1. — P. 227–234.
- [15] Kresse G., Furthmüller J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set // Comput. Mater. Sci. — 1996. — Vol. 6, no. 1. — P. 15–50. — Access mode: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025696000080>.
- [16] Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev. B. — 1996. — Oct. — Vol. 54, no. 16. — P. 11169–11186. — Access mode: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.54.11169>.
- [17] Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. — 1996. — Vol. 77. — P. 3865.
- [18] Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. Erratum: Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. — 1997. — Vol. 78. — P. 1396.
- [19] Blöchl P. E. Projector augmented-wave method // Phys. Rev. B. — 1994. — Dec. — Vol. 50, no. 24. — P. 17953–17979. — Access mode: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.50.17953>.
- [20] Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // Phys. Rev. B. — 1999. — Vol. 59. — P. 1758.
- [21] Pseudopotential and full-electron DFT calculations of thermodynamic properties of electrons in metals and semiempirical equations of state / PR Levashov, GV Sin'ko, NA Smirnov et al. // J. Phys.: Condens. Matter. — 2010. — Vol. 22, no. 50. — P. 505501.
- [22] Baldereschi A. Mean-Value Point in the Brillouin Zone // Phys. Rev. B. — 1973. — Jun. — Vol. 7, no. 12. — P. 5212–5215. — Access mode: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.7.5212>.
- [23] Nosé Shuichi. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods // J. Chem. Phys. — 1984. — Vol. 81, no. 1. — P. 511–519. — Access mode: <http://dx.doi.org/10.1063/1.447334>.
- [24] Quantum molecular dynamics simulation of shock-wave experiments in aluminum / DV Minakov, PR Levashov, KV Khishchenko, VE Fortov // J. Appl. Phys. — 2014. — Vol. 115, no. 22. — P. 223512.
- [25] Zha Chang-Sheng, Boehler Reinhard. Melting of sodium and potassium in a diamond anvil cell // Phys. Rev. B. — 1985. — Vol. 31, no. 5. — P. 3199.
- [26] Microscopic origins of the anomalous melting behavior of sodium under high pressure / Hagai Eshet, Rustam Z Khaliullin, Thomas D Kühne et al. // Phys. Rev. Lett. — 2012. — Vol. 108, no. 11. — P. 115701.
- [27] Desjarlais Michael P. First-principles calculation of entropy for liquid metals // Phys. Rev. E. — 2013. — Vol. 88, no. 6. — P. 062145.
- [28] Ab initio quality neural-network potential for sodium / Hagai Eshet, Rustam Z Khaliullin, Thomas D Kühne et al. // Phys. Rev. B. — 2010. — Vol. 81, no. 18. — P. 184107.