

# ETUDE PAR DYNAMIQUE MOLECULAIRE DES PROPRIETES DE TRANSPORT ATOMIQUE DU MAGNESIUM LIQUIDE

O. Haddag<sup>(1,\*)</sup>, N. Harchaoui<sup>(1)</sup>, J. G. Gasser<sup>(2)</sup> et S. Hellal<sup>(1)</sup>

<sup>(1)</sup>Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ), Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou (UMMTO), Algérie.

<sup>(2)</sup>Laboratoire de Chimie et Physique Approches multiéchelles des Milieux Complexes LCP-A2MC Institut de Chimie, Physique et Matériaux, UFR SciFA, Université de Lorraine, France.

(Reçu le 09 Avril 2015 ; accepté le 13 Juillet 2015 ; publié en ligne le 24 Septembre 2015)

## RESUME:

Nous rapportons quelques résultats les plus pertinents de calculs des propriétés de transport atomique du magnésium à une température juste au dessus du point de fusion. Le point de départ est une description des interactions interioniques au moyen d'un potentiel de paires. Celui-ci est construit dans le formalisme des pseudopotentiels *ab initio* en utilisant deux modèles pour les comparer: le modèle **BHS** et une version plus raffinée le modèle **OB**. Dans une seconde étape, nous mettons en œuvre la méthode de simulation numérique par dynamique moléculaire pour déterminer d'une part la structure ionique et d'autre part pour étudier, grâce à des fonctions d'autocorrélations temporelles appropriées, le phénomène d'autodiffusion et la viscosité. Ces fonctions introduites dans l'équation de Green-Kubo permettent le calcul des coefficients de transport (le coefficient de diffusion et la viscosité dynamique). De manière générale, avec le modèle **OB** les prédictions théoriques restent raisonnables en comparaison avec les données expérimentales et d'autres calculs théoriques.

**MOTS CLES:** Pseudopotentiels *ab initio*, Bachelet-Hamann-Schlüter, Ortiz-Ballone, dynamique moléculaire, métaux liquides, facteur de structure, Green-Kubo, fonctions d'autocorrélation, autodiffusion, viscosité dynamique.

## I. INTRODUCTION

La compréhension des phénomènes de transport atomique est d'une grande importance tant d'un point de vue théorique que d'un point de vue pratique. La recherche dans ce domaine est toujours d'actualité [1-5]. Un grand nombre de conférences internationales y sont également consacrées de manière cyclique [6, 7]. Quoi qu'il en soit, la connaissance des coefficients de transports est cruciale dès lors qu'ils sont des paramètres d'entrée de certaines équations de l'hydrodynamiques plus particulièrement l'équation de Navier-Stokes [8]. A l'échelle macroscopique, le comportement d'un liquide est souvent caractérisé par quelques nombres sans dimensions qui précisément s'expriment en fonction des coefficients de transport. Ce sont, entre autres, le nombre de Reynolds et le nombre de Prandtl [9].

Les propriétés thermodynamiques et physiques de la matière sont gouvernées à l'échelle microscopique par des interactions interparticulaires. Une représentation de ces forces par un potentiel effectif

de paires constitue une bonne modélisation des liquides simples monoatomiques. Dans le cas spécial des métaux, la construction de ce potentiel demande au préalable un traitement quantique de la liaison métallique. A cet effet et pour étudier la structure électronique, nous avons choisi l'approche des pseudopotentiels *ab initio* en utilisant, pour la première fois à notre connaissance, le modèle de Bachelet, Hamann et Schlüter (**BHS**) [10] et celui de Ortiz et Ballone (**OB**) [11] afin de les comparer. Le premier est généré selon des principes physiques bien fondés, à partir de calculs **LDA-DFT** « all-electrons » pour un état de référence qui est celui de l'atome libre. De type « norm-conserving », il est censé être « transférable » pour un environnement métallique. La construction du modèle **OB** est faite dans le même esprit. Dans un certain sens, c'est une version raffinée du modèle **BHS** qui, en incluant la « correction du gradient » selon le schéma théorique **GC-LDA-BP** de Becke [12] et Perdew [13], prend mieux en compte l'effet d'échange et corrélations. Ces deux modèles de pseudopotentiels *ab initio* pour l'atome libre, ont par ailleurs la même forme

<sup>(\*)</sup>Corresponding author, [haddagouiza@yahoo.fr](mailto:haddagouiza@yahoo.fr)

paramétrée. Les paramètres du modèle **BHS** sont tabulés dans l'article de référence [10] pour la plupart des éléments du tableau périodique (de l'hydrogène au plutonium). Au contraire, ceux du modèle **OB** ont été calculés uniquement pour certains métaux [11] : les métaux alcalino-terreux y compris le magnésium, le mercure et le cadmium. La plupart de ces métaux ont une structure électronique compliquée reflétée par leurs densités d'états (DOS). Hormis pour le béryllium et le magnésium pour lesquels une théorie des électrons presque libres est justifiée, les deux modèles de pseudopotentiels ci-dessus décrivent mal les interactions dans le cas des autres éléments. Ainsi, les autres alcalino-terreux possèdent une bande « d » vide au dessus du niveau de Fermi qui s'en approche au fur et à mesure que l'élément est plus lourd [14]. Cette proximité de la bande « d » a une grande influence sur les propriétés électroniques [15].

Dans le cas du magnésium liquide, les potentiels effectifs respectifs issus de ces deux modèles ont des comportements très différents. Pour tester la validité de chacun des deux modèles, nous avons déterminé à partir des « expériences » de simulations par dynamique moléculaire, le facteur de structure ionique. Ce test est en effet l'un des plus contraignants qui soit car il a été montré ailleurs [16, 17] que dans une théorie des liquides modélisés par des interactions de paires, il existe une relation biunivoque entre le potentiel interionique et le facteur de structure (défini plus loin). La comparaison avec les données expérimentales des facteurs de structures que nous avons calculés, montre que le modèle **OB** qui prend mieux en compte l'échange et corrélation, décrit de manière satisfaisante la structure du magnésium liquide. En revanche, les résultats avec **BHS** sont seulement qualitatifs. Pour vérifier encore plus la validité du modèle de pseudopotentiel **OB**, nous avons entrepris d'analyser les propriétés dynamiques du magnésium liquide. Comme étude préliminaire, nous avons opté pour deux propriétés liées au transport atomique : l'autodiffusion et la viscosité. Dans le formalisme de Green-Kubo [18-20] qui est l'expression du théorème de « fluctuation-dissipation », les coefficients de transport sont calculés à partir de fonctions de corrélations temporelles appropriées [2, 8, 9]. Nous avons ainsi déterminé par la dynamique moléculaire la fonction d'autocorrélation des vitesses pour déduire le coefficient d'autodiffusion. De la même manière, la viscosité dynamique ou de cisaillement (shear viscosity) a été estimée à partir de la fonction d'autocorrélation des éléments non diagonaux du tenseur des contraintes. Le coefficient d'autodiffusion calculé dont aucune mesure

expérimentale n'existe, est par ailleurs comparé avec d'autres calculs théoriques. La viscosité dynamique trouvée est trop grande en comparaison avec donnée expérimentale disponible. On retiendra cependant que les données expérimentales relatives à la diffusion et à la viscosité sont pour la plupart extrêmement dispersées. Pour une température donnée elles peuvent parfois différer d'un facteur deux [2].

## II. APPROCHE THEORIQUE

### II.1 Les modèles de pseudopotentiels *ab initio* BHS et OB

Les deux modèles de pseudopotentiels *ab initio* pour l'ion libre ont la même forme paramétrée suivante

$$\hat{W}^{\text{ion}} = \sum_{\ell=0}^{\ell=\ell_0} V_{\ell}^{\text{ion}}(\mathbf{r}) \hat{P}_{\ell} \quad (1)$$

$$\text{où } \hat{P}_{\ell} = \sum_{m=-\ell}^{m=+\ell} |\ell, m\rangle \langle \ell, m| \quad (2)$$

est l'opérateur de projection dans les sous espaces de moment angulaire  $\ell$ . Le développement Eq.1 du pseudopotentiel ionique total admet en principe une infinité de termes. En pratique, la plus grande valeur ( $\ell = \ell_0$ ) est limitée à 2 ou 3. Dans la littérature, il est alors suggéré l'une ou l'autre des deux approximations suivantes pour les composantes angulaires :

- approche de Heine-Abarenkov :

$$V_{\ell}^{\text{ion}}(\mathbf{r}) = V_{\ell_0}^{\text{ion}}(\mathbf{r}) \quad , \quad \forall \ell \geq \ell_0 \quad (3)$$

- approche de Shaw :

$$V_{\ell}^{\text{ion}}(\mathbf{r}) = 0 \quad , \quad \forall \ell > \ell_0 \quad (4)$$

La composante angulaire  $V_{\ell}^{\text{ion}}(\mathbf{r})$  du pseudopotentiel ionique total, est décomposée en un potentiel local indépendant du moment angulaire  $\ell$ , et une contribution non locale dépendant de  $\ell$ . Soit :

$$V_{\ell}^{\text{ion}}(\mathbf{r}) = V^{\text{core}}(\mathbf{r}) + V_{\ell}^{\text{ion}}(\mathbf{r}) \quad (5)$$

Le potentiel local à longue portée est donné par **BHS** sous la forme :

$$V^{\text{core}}(\mathbf{r}) = -\frac{Z_V}{r} \sum_{i=1}^2 C_i^{\text{core}} \text{erf} \left[ \left( \alpha_i^{\text{core}} \right)^{1/2} r \right] \quad (6)$$

où  $Z_V$  est la valence chimique tandis que  $C_i^{\text{core}}$ ,  $\alpha_i^{\text{core}}$  et  $\alpha_i$  sont des paramètres tabulés pour la plupart des éléments du tableau périodique

(**BHS**, [10]). La forme asymptotique du potentiel local :

$$V_{\text{core}}^{\text{core}}(r) \approx -\frac{Z_V}{r} \quad (7)$$

implique la relation :

$$C_1^{\text{core}} + C_2^{\text{core}} = 1 \quad (8)$$

La partie non locale est développée en termes de fonctions gaussiennes comme suit :

$$V_{\ell}^{\text{ion}}(r) = \sum_{i=1}^3 (A_i + r^2 A_{i+3}) e^{-\alpha_i \cdot r^2} \quad (9)$$

Les paramètres  $\{\alpha_i \equiv \alpha_i(\ell), i = 1, 2, 3\}$  de (9) dans leur ensemble, dépendent implicitement du moment angulaire  $\ell$ . Ils sont également tabulés par les mêmes auteurs. Cependant, les paramètres  $\{A_i \equiv A_i(\ell), i = 1, 2, 3\}$  ne sont pas fournis directement car ceux-ci ont un nombre trop important de chiffres significatifs. Ils sont alors obtenus à partir d'autres coefficients tabulés  $C_i$  en effectuant une transformation mathématique expliquée dans l'article de référence. Le modèle **OB** a la même décomposition ci-dessus. Seuls les paramètres diffèrent et sont rapportés dans l'article de référence pour certains éléments chimiques cités en introduction.

## II.2 Le potentiel effectif interionique

L'expression formelle du potentiel effectif interionique est bien connue [21-24]. En utilisant les unités atomiques, elle s'écrit :

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{Z_V^2}{r} \left[ 1 - \frac{2}{\Omega_0} \int_0^{\infty} F_N(q) \frac{\sin(qr)}{q} dq \right] \quad (10)$$

Le potentiel effectif  $V_{\text{eff}}(r)$  dépend du modèle de pseudopotentiel par l'intermédiaire de la « caractéristique vecteur d'onde-énergie normalisée »  $F_N(q)$ . Pour un modèle de pseudopotentiel local tel que celui de Fiolais *et al.* [25, 26], cette fonction (appelée parfois fonction de Cochrane en physique du solide), prend la forme analytique simple suivante [23]:

$$F_N(q) = \frac{(q)-1}{(q)[1 - G_{\text{xc}}(q)]} [w_0(q)]^2 \quad (11)$$

où  $w_0(q)$  est le facteur de forme du pseudopotentiel non écranté. Celui-ci est normalisé par le facteur :  $\frac{4 Z_V}{\Omega_0 q^2}$  ( $\Omega_0$  étant le volume moyen par atome

et  $Z_V$  la valence chimique). La fonction  $G_{\text{xc}}(q)$  dans Eq.11 est la correction du champ local. Celle-ci décrit les effets d'échanges et corrélations parmi les électrons de conduction.

Pour des pseudopotentiels *ab initio* tels que ceux considérés (**BHS** ou **OB**), ceux-ci étant des opérateurs non locaux [21-23], cette fonction s'exprime de manière très compliquée en termes de l'élément de matrice du modèle. Ils sont d'abord écranté de manière non triviale par la fonction diélectrique  $(q)$ . Pour cette dernière, plusieurs expressions sont données dans la littérature. Dans les présents calculs, nous avons utilisé l'une des plus récentes et bien fondée d'un point de vue théorique (équation 32 dans Réf. [27]). Elle est ici simplement notée **HIG**. Il s'ensuit que la fonction diélectrique  $(q)$  (dite «electron-test-charge » dielectric function) est liée à la fonction diélectrique dans l'approximation de Hartree  $(q)$  par la relation :

$$(q) = 1 + [1 - G_{\text{xc}}(q)] (q) \quad (12)$$

## II.3 La structure ionique

Pour un milieu dense désordonné tel qu'un liquide, la fonction de corrélation de paires notée  $g(r)$  est une mesure de l'ordre local. Elle donne la probabilité de trouver un atome à la distance «  $r$  » d'un autre atome pris comme référence. Sa contrepartie dans l'espace réciproque, est le facteur de structure statique  $S(q)$ . Cette grandeur est d'une grande importance car elle est directement accessible par des expériences de diffusion de rayons X [28] ou de neutrons. Elle est définie par :

$$S(q) = 1 + \int [g(r) - 1] \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{r}) d^3\vec{r} \quad (13)$$

où  $N/V$  est la densité de particules (à la limite thermodynamique) du système étudié. Le système de volume  $V$  comprend  $N$  particules.

## II.4 Propriétés de transport atomique

Dans le formalisme de Green-Kubo [18-20], le coefficient d'autodiffusion  $D$  est donné par l'intégrale:

$$D = \int_0^{\infty} Z(t) dt \quad (14)$$

où la fonction d'autocorrélation des vitesses  $Z(t)$  est donnée par la moyenne thermodynamique:

$$Z(t) = \frac{1}{3} \langle \vec{v}(t) \cdot \vec{v}(0) \rangle \quad (15)$$

Dans cette équation,  $\vec{v}(0)$  est la vitesse d'une particule à un instant initial et  $\vec{v}(t)$  est la vitesse de la même particule à un temps ultérieur «  $t$  ». De la même manière, la viscosité dynamique est donnée par intégration de la fonction d'autocorrélation temporelle d'un élément non diagonal du tenseur de pression  $\wp(t)$  [8, 29]:

$$= \frac{1}{k_B T} \int_0^{\infty} dt \langle \wp(t) \wp(0) \rangle ; \neq \quad (16)$$

Si  $C(t)$  est l'une ou l'autre des deux fonctions d'autocorrélation temporelles précédente, une description des propriétés de transport atomiques est également donnée par la fonction spectrale définie par la transformée de Fourier :

$$\hat{C}(\omega) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} C(t) \exp(i \omega t) dt \quad (17)$$

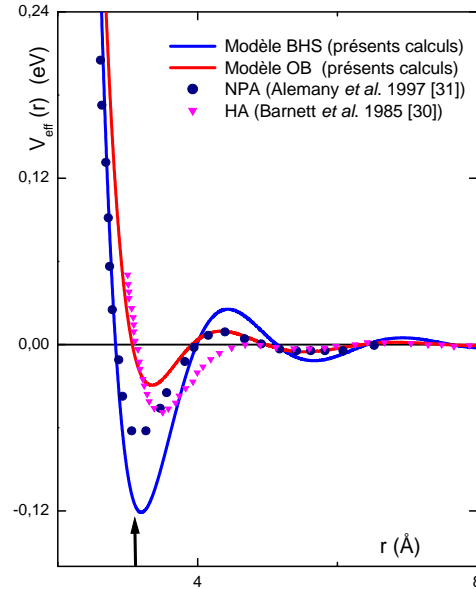
Il est remarquable que la fonction spectrale associée à la fonction d'autocorrélation des vitesses est l'équivalent pour les liquides de la densité d'états des phonons définie en physique du solide.

### III. RESULTATS ET DISCUSSIONS

Nous avons évalué en utilisant Eq.10 les potentiels effectifs issus des deux modèles de pseudopotentiels *ab initio* **BHS** et **OB**. Les résultats relatifs au magnésium liquide à la température de  $T=680$  °C, sont montrés ensemble sur Fig.1 pour être comparés. Ils sont également comparés avec d'autres calculs théoriques : les calculs menés avec le modèle de pseudopotentiel « first principles » de Heine et Abarenkov [30], et enfin les calculs issus du formalisme **NPA** (Neutral Pseudo Atom) [31]. Tous ces potentiels sont typiques des métaux alcalins ou alcalino-terreux. Aux distances plus petites que la distance interatomique moyenne, celle-ci étant indiquée sur Fig.1 par la position d'une flèche, les potentiels présentent une partie fortement répulsive. Aux distances suffisamment grandes, ils exhibent des oscillations qui s'amortissent rapidement. Aux distances intermédiaires, les potentiels effectifs possèdent un premier minimum négatif.

Si on compare les différents modèles, on remarque que les différences sont notables au voisinage du

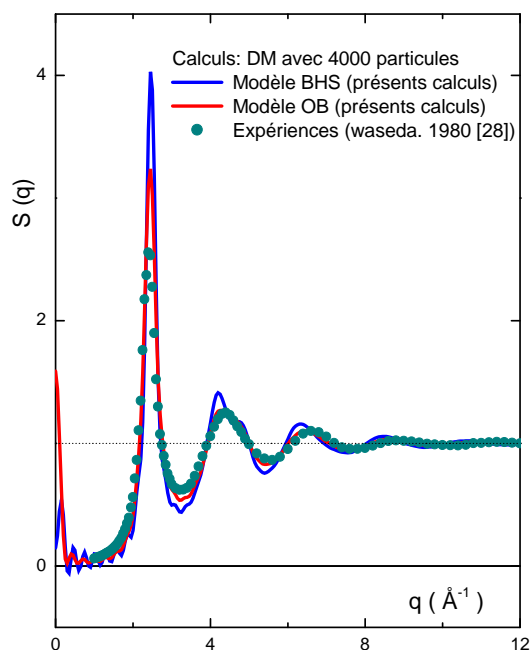
premier minimum. Ainsi, la profondeur de celui-ci est relativement grande pour le modèle **BHS**. Pour ce dernier, les amplitudes des oscillations de Friedel sont en outre beaucoup plus importantes que pour les autres modèles. Pour les distances inter ioniques correspondant à la partie répulsive, les potentiels issus respectivement du modèle **BHS** et des calculs **NPA** sont identiques. Par contre et pour cette même région, les présents calculs avec le modèle **OB** sont à rapprocher avec ceux du modèle Heine-Abarenkov (**HA**).



**Figure 1:** Potentiels effectifs de paires du magnésium à 680°C, calculés avec les modèles de pseudopotentiels **BHS** et **OB** (Fonction d'échange et corrélation: **HIG**). Comparaison avec d'autres calculs théoriques [30, 31].

Pour tester la validité des potentiels effectifs interioniques construits dans le formalisme des pseudopotentiels, nous les avons employés dans l'étude des propriétés du magnésium liquide. L'outil de calcul est la méthode de simulations numériques par la dynamique moléculaire classique (DM). On a considéré un échantillon comprenant soit 4000 atomes (pour l'étude les propriétés structurales) soit 864 atomes (pour l'étude des propriétés de transport atomique). Ces atomes sont enfermés dans une boîte de simulation cubique dont le côté  $L$  est déterminé simplement à partir de la densité expérimentale du magnésium liquide à 680 °C. Dans l'ensemble canonique NVT, les équations du mouvement des atomes ont été intégrées en utilisant un code de calcul basé sur l'algorithme de Verlet [29]. Le potentiel interionique est tronqué dans le domaine des oscillations de Friedel, à des distances correspondant à environ un tiers du côté de la boîte de simulation. Nos premiers calculs décisifs concernent la structure ionique du magnésium

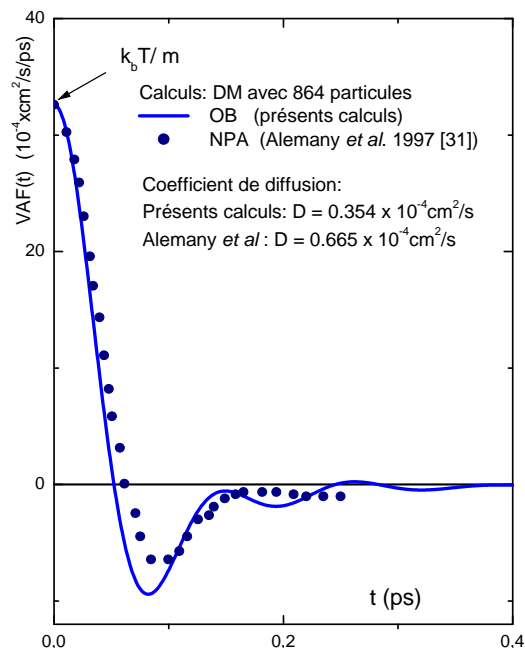
liquide. Le facteur de structure  $S(q)$  calculé en usant d'Eq.13, est représenté sur Fig.2.



**Figure 2:** Facteurs de structure du magnésium à 680 °C, calculés avec les modèles de pseudopotentiels **BHS** et **OB** (Fonction d'échange et corrélation: **HIG**).

Leur allure est typique des métaux liquides : un premier pic élevé suivi de pics secondaires dont les amplitudes décroissent et correspondent à des oscillations qui s'atténuent en tendant vers l'unité. La comparaison des courbes théoriques avec celles issues de l'expérience, montre qu'elles sont en phase avec ces dernières. Par contre l'amplitude des pics est beaucoup plus grande que ce que montre l'expérience [28]. On observe néanmoins que le modèle **OB** décrit mieux la structure ionique du magnésium que ne peut le faire le modèle **BHS**. Dans le cas du modèle **OB**, la hauteur du premier pic du facteur de structure est beaucoup plus petite que celle de **BHS**. Qui plus est, hormis le pic principal, les amplitudes des oscillations secondaires sont pratiquement les mêmes que celles du facteur de structure expérimental.

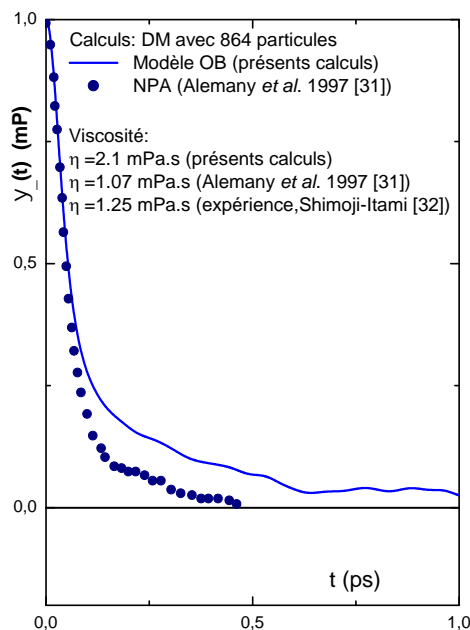
Dans l'étude des propriétés de transport atomique, nous avons calculé à partir de l'évolution des vitesses des atomes en fonction du temps, la fonction d'autocorrélation des vitesses  $Z(t)$ . Notre courbe calculée avec le modèle **OB**, est dans Fig.3 comparée à celle obtenue par Alemany *et al.* [31].



**Figure 3:** Fonction d'autocorrélation des vitesses du magnésium à 680 °C, calculée avec le modèle de pseudopotentiel **OB** (Fonction diélectrique: **HIG**). Comparaison avec d'autres calculs théoriques [31].

Le coefficient d'autodiffusion est déterminé en utilisant la relation Eq.14. La valeur calculée que l'on obtient :  $D = 0.354 \times 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$ , est à comparer à celle calculée également à 680 °C par Alemany *et al.* [31] :  $D = 0.665 \times 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$ , avec la méthode **NPA**. Utilisant le modèle de pseudopotentiel local de Fiolhais *et al.*[25], Wax *et al.* [26] obtiennent la valeur :  $D = 0.440 \times 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$  à 697 °C (variante « universelle » du modèle) et  $D = 0.537 \times 10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$  à 728 °C (variante « individuelle » du modèle). Sachant que le coefficient de diffusion  $D$  augmente avec la température, les valeurs de Wax *et al.*, après correction de température, seraient certainement beaucoup plus proches de celles obtenues dans les présents calculs à 680 °C.

Ceci étant et à notre connaissance, il n'existe pas de donnée expérimentale du coefficient d'autodiffusion du Magnésium. L'application que nous avons faite dans l'étude de la viscosité du magnésium pour lequel les interactions sont décrites par le modèle de pseudopotentiel **OB** et la fonction diélectrique **HIG**, conduit aux résultats montrés dans Fig.4 (la fonction normalisée  $N(t)$  représentant l'intégrant dans Eq.16). Finalement, on déduit, en utilisant Eq.16, une viscosité dynamique égale à 2.1 mPa.s. Cette valeur est à comparer avec la valeur expérimentale :  $\eta = 1.25 \text{ mPa.s}$  au point de fusion [32] et  $\eta = 1.15 \text{ mPa.s}$  à la température 680 °C [33].



**Figure 4:** Fonction d'autocorrélation des contraintes (normalisée) du magnésium à 680 °C, calculée avec le modèle de pseudopotentiel **OB** (Fonction diélectrique **HIG**).

Ces auteurs emploient la méthode **NPA**. Les deux courbes sont caractéristiques des liquides à une température proche du point de fusion. Elles présentent des oscillations amorties avec une région négative plus importante pour le modèle **OB**. Celles-ci sont interprétées comme le phénomène de la rétrodiffusion. En effet, à un instant donné « t », le mouvement d'un atome pris comme référence, est

géné par des atomes proches voisins qui le cernent et l'enferment ainsi dans une sorte de cage : la vitesse de l'atome considéré peut changer de direction sous l'effet de collisions. Ce phénomène de rétrodiffusion qui correspond à un régime vibrationnel, est appelé dans la littérature anglo-saxonne « caging effect ». Ce régime vibrationnel est en fait une réminiscence de l'état cristallin. La température du métal liquide est proche du point de fusion (651 °C).

#### IV. CONCLUSION

Nous avons mené une étude comparative de deux modèles de pseudopotentiels *ab initio* **BHS** et **OB**. Tous deux sont générés suivant un même schéma théorique avec toutefois des représentations de l'effet d'échange et corrélations différentes. Pour jauger les qualités de chacun de ces deux modèles, nous avons employé les potentiels effectifs interioniques dont ils sont issus dans des calculs de simulations par dynamique moléculaire des propriétés statiques et dynamiques du magnésium liquide. Il s'avère que seul le modèle **OB** qui est une version raffinée du modèle **BHS**, conduit à un facteur de structure théorique du magnésium qui est raisonnable en comparaison avec celui donné par l'expérience. Les propriétés de transport atomique (diffusion et viscosité) qui sont également sensibles aux détails des potentiels d'interactions interioniques, sont décrites de manière seulement semi-quantitative par les modèles de pseudopotentiels *ab initio*.

[1] V. A. Levashov, J. R. Morris, and T. Egami; J. Chem. Phys. **138**, 044507 (2013).

[2] M. Mouas, J. G. Gasser, S. Hellal, and B. Grosdidier; CALPHAD: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry **44**; 102 (2014).

[3] S. Yu and M. Kaviani; J. Chem. Phys. **140**, 064303 (2014).

[4] G. A. Orozco, O. A. Moulto, H. Jiang, I. G. Economou, and A. Z. Panagiotopoulos, J. Chem. Phys. **141**, 234507 (2014).

[5] Yu. Plevachuk, V. Sklyarchuk, O. Alekhin, O. Bilous; J. of Non-Cryst. Solids **391**, 12 (2014).

[6] XV Liquid and Amorphous Metal (LAM-15) Conference, Beijing China Monday, September 16, 2013 to Friday, September 20, 2013.

[7] 3<sup>rd</sup> international Workshop on "Measuring Techniques for Liquid Metal Flows" (MTLM). Dresden, Germany (2015).

[8] J. P. Hansen and I.R. Mac Donald; "Theory of Simple Liquids", Acad. Press, New York (1986).

[9] N. H. March and M. P. Tosi, "Introduction to the Liquid State Physics". World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd (2002).

[10] G. B. Bachelet, D. R Hamann, and M. Schlüter; Phys. Rev. B **26**, 4199 (1982).

[11] G. Ortiz and P. Ballone; Phys. Rev. B **43**, 6376 (1991).

[12] A. D. Becke; Phys. Rev. A **38**, 3098 (1988).

[13] J. P. Perdew; Phys. Rev. B **33**, 8800 (1986).

[14] R. Albaki; Thèse de Doctorat, Université de Metz (2002).

[15] Jank W. and Hafner J.; Phys. Rev. B **42**, 6926 (1990).

[16] P. A. Egelstaff; "An introduction to the Liquid State", Oxford University Press, (1992).

[17] C. G. Gray and K. E. Gubbins; "Theory of Molecular Fluids". Clarendon Press, Oxford (1984)

[18] M. S. Green; J. Chem. Phys. **19**, 1036 (1951).

[19] R. Kubo; J. Phys. Soc. Japan. **12**, 570 (1957).

[20] R. Kubo; Rep. Prog. Phys. **29**, 255 (1966).

- [21] W. A. Harrison; “*Pseudopotentials in the Theory of Metals*”, Benjamin, New York (1966).
- [22] S. Hellal; Thèse de Doctorat d’Etat, Université mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, Algérie (2006).
- [23] S. Hellal, J. G. Gasser, B. Grosdidier; *J. of Non-Cryst. Solids* **353**, 3495 (2007).
- [24] N. Harchaoui, S. Hellal, J. G. Gasser, and B. Grosdidier, *Phil. Mag.* **90**, 1307 (2010).
- [25] C. Fiolhais, J. P. Perdew, S. Q. Armster, J. M. MacLaren, M. Brajczewska; *Phys. Rev. B* **51**, 14001 (1995).
- [26] J. F. Wax, R. Albaki, and J. L. Bretonnet, *Phys. Rev B* **62**, 014818 (2000).
- [27] Hellal S., Gasser J.G., and Issolah A.; *Phys. Rev. B* **68**, 94204 (2003).
- [28] Waseda Y; “*The Structure of non Crystalline Materials*”, Mc Graw-Hill, (New York) 1980.
- [29] Allen M.P and Tildesley D.J; “*Computer Simulation of Liquids*”, Clarendon Press. Oxford (1990).
- [30] Barnett R.N., Cleveland C.L., and Landman U.; *Phys. Rev. Let.* **54**, 1679 (1985).
- [31] Alemany M.M.G., Casas J., Rey C., Gonzalez L.E., and Gallego L.J.; *Phys. Rev. E* **56**, 6818 (1997).
- [32] Iida T. and Guthrie R.I.L., “*The Physical Properties of Liquid Metals*”, Clarendon Press-Oxford, (1993).
- [33] Beers Z.; “*Liquid Metals*”, Marcel Dekker, Inc , New York, 1972.